

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

Giovani Cerbato

**ESQUEMAS NUMÉRICOS PARA A RECONSTRUÇÃO DO GRADIENTE EM
MALHAS POLIGONAIS**

Florianópolis

2012

Giovani Cerbato

**ESQUEMAS NUMÉRICOS PARA A RECONSTRUÇÃO DO GRADIENTE EM
MALHAS POLIGONAIS**

Dissertação submetida ao Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
para a obtenção do grau de Mestre em
Engenharia Mecânica.

Orientador: António Fábio Carvalho da
Silva

Coorientador: Fernando Sandro Velasco
Hurtado

Florianópolis

2012

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do
Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Cerbato, Giovanni

Esquemas numéricos para a reconstrução do gradiente em
malhas poligonais [dissertação] / Giovanni Cerbato ;
orientador, Antônio Fábio Carvalho da Silva ; co-
orientador, Fernando Sandro Velasco Hurtado. -
Florianópolis, SC, 2012.

152 p. ; 21cm

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. Reservatórios de Petróleo. 3.
Esquemas Numéricos. 4. Malhas Poligonais. I. Silva, Antônio
Fábio Carvalho da. II. Hurtado, Fernando Sandro Velasco.
III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

Giovani Cerbato

**ESQUEMAS NUMÉRICOS PARA A RECONSTRUÇÃO DO GRADIENTE EM
MALHAS POLIGONAIS**

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de “Mestre em Engenharia Mecânica”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 13 de Setembro 2012.

Júlio César Passos, Dr., Coordenador do Curso

Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng., Orientador

Fernando Sandro Velasco Hurtado, Dr. Eng., Coorientador

BANCA EXAMINADORA

Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr.Eng., Presidente

Clovis Raimundo Maliska, Ph.D.

Emilio Ernesto Paladino, Dr.Eng.

Mário César Zambaldi, Ph.D.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Clovis R. Maliska pelo total incentivo a iniciar o mestrado e por ter aberto as portas do laboratório SINMEC de uma maneira tão receptiva que nunca imaginava ter encontrado.

Ao professor António Fábio pela disponibilidade, orientação prestada nas correções e discussões referentes aos tópicos abordados.

Ao Fernando Hurtado pela dedicação, orientação, comprometimento e pelo constante compartilhamento de seus vastos conhecimentos.

Aos integrantes do SIGER 2, Ederson, Gustavo, Aymar e Fernando Hurtado. A contribuição deste grupo foi de suma importância, todas as reuniões e discussões ajudaram muito o desenvolvimento deste trabalho.

Aos integrantes do laboratório SINMEC por toda ajuda recebida por meio de informações técnicas, apoio, amizade, e por terem tornado o ambiente de trabalho o melhor possível. Em especial à Tatiane que sempre esteve disposta a ajudar e pela sua preocupação com o bem estar de todos e ao Leonardo pela ajuda com o LaTeX.

À Agência Nacional do Petróleo pelo apoio financeiro concedido através da bolsa de estudos.

Ao POSMEC (Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica) pela estrutura oferecida e a disponibilização de um curso de mestrado de tão alto nível. Ao corpo docente do programa pela dedicação e transmissão de seus conhecimentos nas disciplinas oferecidas.

Ao meu “irmão” Dalpi por toda ajuda, parceria, incentivo, amizade e diversas discussões sobre os mais variados assuntos. Ao meu outro “irmão” Chico pelo incentivo, parceria, alegria e preocupação com meu bem estar. À Dona Rita e seu Francisco por terem me acolhido com carinho.

À toda minha família, pai, mãe, Rica, Eduarda, Milena, Tia Ana, Tia Dirce, Tia Iva por terem acreditado em mim, por valorizarem as minhas decisões e pelo incentivo incondicional. À minha namorada, amiga, parceira Juciane por todo carinho, amor, compreensão e paciência.

À Deus por ter me dado saúde, força de vontade e por ter colocado
pessoas tão especiais na minha vida.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	xiii
Lista de Símbolos	xv
Resumo	xix
Abstract	xxi
1 Introdução	1
1.1 Preliminares	1
1.2 Motivação	3
1.3 Objetivos e contribuições	5
1.4 Malhas poligonais	6
1.5 Problema físico	9
1.6 Organização do trabalho	14
2 Métodos de reconstrução explícita do gradiente	17
2.1 Introdução	17
2.2 Fórmula de Green-Gauss	19
2.2.1 Abordagem <i>cell-based</i>	22
2.2.1.1 Média aritmética	23
2.2.1.2 Média ponderada pela distância	23
2.2.1.3 Procedimento com um passo	26
2.2.1.4 Procedimento com dois passos	26
2.2.1.5 Faces de fronteira	27
2.2.2 Abordagem <i>vertex-based</i>	28
2.2.2.1 Ponderação pelo inverso da distância	29
2.2.2.2 Procedimento do pseudolaplaciano	30
2.2.2.3 Vértices de fronteira	34
2.2.2.4 Obtenção dos valores de pressão nas faces	34

2.2.3	Comparação entre as abordagens <i>cell-based</i> e <i>vertex-based</i>	35
2.3	Mínimos quadrados	36
2.3.1	Equações normais	40
2.3.2	Fatoração QR	42
2.3.3	Comentários	43
3	Análise comparativa dos métodos de reconstrução	45
3.1	Introdução	45
3.1.1	Funções analisadas	46
3.1.2	Malhas consideradas	49
3.1.3	Norma do erro analisada	55
3.2	Convergência dos métodos	57
3.2.1	Testes com diferentes funções	59
3.2.1.1	Testes com a função linear	59
3.2.1.2	Testes com a função oscilatória	72
3.2.1.3	Testes com a função exponencial	75
3.2.1.4	Testes com a função descontínua	76
3.2.1.5	Comentários	79
3.2.2	Testes com diferentes malhas	79
3.2.2.1	Testes com as malhas não-conformes	80
3.2.2.2	Testes com as malhas com razão de aspecto alta	82
3.2.2.3	Testes com as malhas com distorção aleatória	86
3.2.2.4	Testes com as malhas com distorção senoidal	88
3.2.2.5	Comentários	92
3.3	Comparação dos tempos de computação	95
4	Aplicação à discretização de um modelo de escoamento monofásico	103
4.1	Introdução	103
4.2	Discretização da equação da conservação de massa	104
4.3	Aproximação dos fluxos	107
4.4	Volumes de controle de fronteira	115
5	Resultados	119
5.1	Introdução	119
5.2	Algoritmo de solução	119

5.3	Especificação do problema	120
5.4	Resultados para o caso 1	122
5.4.1	Análise da influência dos métodos de reconstrução . .	122
5.4.2	Análise da influência da geometria das malhas	124
5.4.3	Análise da influência da razão de anisotropia	126
5.4.4	Comentários	130
5.5	Resultados para o caso 2	132
5.5.1	Análise da influência dos métodos de reconstrução . .	133
5.5.2	Análise da influência da geometria das malhas	133
6	Conclusão	137
6.1	Principais conclusões	138
	Referências	141
A	Deduções relativas ao procedimento do pseudolaplaciano	145
A.1	Condição de pseudolaplaciano nulo	145
A.2	Obtenção dos fatores de ponderação	148
B	Caso especial da regra do ponto médio	151

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Exemplos de malhas <i>corner-point</i> extraídas de [26].	3
Figura 1.2	Ilustração em 3D da forma especial de discretização de um reservatório. Modificada de [27].	4
Figura 1.3	Ilustração em 2D da forma especial de discretização. Malha poligonal está apresentada na cor laranja.	4
Figura 1.4	Entidades envolvidas nas malhas poligonais: (a) Volume de controle, (b) Faces e (c) Vértices.	8
Figura 1.5	Representação de uma malha poligonal com destaque para volume de controle p e suas faces.	9
Figura 1.6	Representação de uma malha poligonal com ênfase nos dois volumes de controle vizinhos que possuem a face f em comum.	9
Figura 1.7	Notação empregada para um vértice em uma malha poligonal e dos volumes de controle que o cercam.	10
Figura 1.8	Notação utilizada para os vizinhos de um volume de controle p	10
Figura 2.1	Diagrama ilustrativo dos métodos de reconstrução do gradiente empregados.	18
Figura 2.2	Esquema ilustrativo da aplicação dos métodos de reconstrução do gradiente.	18
Figura 2.3	Representação de um volume no qual é possível utilizar o teorema da divergência.	19
Figura 2.4	Representação de um volume de controle poligonal enfatizando os centroides das faces e os vetores área destas. . .	21
Figura 2.5	Volumes de controle e centroide da face.	22

Figura 2.6	Ilustração dos elementos geométricos utilizados na variante da média ponderada pela distância.	24
Figura 2.7	Representação do ângulo θ	25
Figura 2.8	Volume de controle e faces de fronteira.	27
Figura 2.9	Volumes de controle que cooperam para a determinação do valor da pressão no vértice.	28
Figura 2.10	Volumes de controle que contribuem para a determinação do gradiente de pressão associado ao volume de controle p	29
Figura 2.11	Demonstração do vetor $\mathbf{r}_{p_1,v}$	30
Figura 2.12	Vértice deslocado do triângulo que se forma conectando os centroides dos volumes p_1, p_2 e p_3	33
Figura 2.13	Entidades envolvidas na determinação do valor de pressão em um vértice de fronteira.	35
Figura 2.14	Volumes de controle envolvidos na aproximação da pressão na face f . À esquerda <i>cell-based</i> e à direita <i>vertex-based</i>	36
Figura 2.15	Volume de controle p e seus vizinhos.	37
Figura 2.16	Ilustração de um sistema linear onde \mathbf{b} não pertence ao espaço coluna de \mathbb{A} . Reproduzida de [36].	40
Figura 3.1	Origem do sistema de coordenadas nas malhas analisadas.	47
Figura 3.2	Campo de pressão segundo a função linear.	48
Figura 3.3	Campo de pressão segundo a função oscilatória.	49
Figura 3.4	Campo de pressão segundo a função exponencial.	49
Figura 3.5	Campo de pressão segundo a função descontínua.	50
Figura 3.6	Campo do gradiente de pressão referente à função linear. ..	50
Figura 3.7	Campo do gradiente de pressão referente à função oscilatória.	51
Figura 3.8	Campo do gradiente de pressão da função exponencial. ..	51
Figura 3.9	Campo do gradiente de pressão da função descontínua. ..	52

Figura 3.10	Malhas:(a)regular, (b)não-conforme, (c)com razão de aspecto alta, (d)com distorção aleatória, (e)com distorção senoidal.....	53
Figura 3.11	Malha regular mostrando os volumes de controle laterais e centrais.....	59
Figura 3.12	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares considerando a função linear. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	61
Figura 3.13	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares considerando a função linear. Método com abordagem <i>vertex-based</i>	61
Figura 3.14	Volumes centrais nas malhas regulares.	62
Figura 3.15	Volumes laterais nas malhas regulares.	63
Figura 3.16	Distribuição do erro na malha regular com 85 volumes de controle utilizando GGCBA_1S.	63
Figura 3.17	Volume do canto inferior esquerdo da malha regular com 85 volumes de controle. Representação dos pontos fornecidos pelo método GGCBA_1S e do vetor gradiente da função linear.	64
Figura 3.18	Volume do canto superior esquerdo da malha regular com 85 volumes de controle. Representação dos pontos fornecidos pelo método GGCBA_1S e do vetor gradiente da função linear.	65
Figura 3.19	Distribuição do erro na malha regular mais grosseira utilizando GGCBA_2S.	67
Figura 3.20	Distribuição do erro na malha com 85 volumes utilizando GGCBA_2S. Mesma faixa de valores empregada na figura 3.16.	68
Figura 3.21	Volumes centrais nas malhas regulares analisando o método GGCBW_1S.	69
Figura 3.22	Volumes laterais nas malhas regulares analisando o método GGCBW_1S.	70

Figura 3.23	Distribuição do erro na malha com 85 volumes de controle utilizando GGCBW_1S.	70
Figura 3.24	Distribuição do erro na malha regular com 85 volumes de controle utilizando GGVBID.	72
Figura 3.25	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função oscilatória. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	73
Figura 3.26	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função oscilatória. Métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	73
Figura 3.27	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função oscilatória. Métodos utilizando mínimos quadrados.	74
Figura 3.28	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função exponencial. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	75
Figura 3.29	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função exponencial. Métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	76
Figura 3.30	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função exponencial. Métodos utilizando mínimos quadrados.	76
Figura 3.31	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função descontínua. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	77
Figura 3.32	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função descontínua. Métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	78
Figura 3.33	Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função descontínua. Métodos utilizando mínimos quadrados.	78
Figura 3.34	Distribuição do erro na malha com 742 volumes de controle utilizando LSSID. Função descontínua.	79

Figura 3.35	Faces do volume de controle p localizado na interface. . . .	81
Figura 3.36	Volumes de controle vizinhos a um volume de menor tamanho na interface.	81
Figura 3.37	Volumes adjacentes aos vértices v_1 , v_2 e v_3	82
Figura 3.38	Convergência do gradiente de pressão nas malhas não-conformes. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	83
Figura 3.39	Convergência do gradiente de pressão nas malhas não-conformes. Métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	83
Figura 3.40	Convergência do gradiente de pressão nas malhas não-conformes. Métodos utilizando mínimos quadrados.	84
Figura 3.41	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com razão de aspecto alta. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	84
Figura 3.42	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com razão de aspecto alta. Métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	85
Figura 3.43	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com razão de aspecto alta. Métodos utilizando mínimos quadrados.	85
Figura 3.44	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção aleatória. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	86
Figura 3.45	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção aleatória. Métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	87
Figura 3.46	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção aleatória. Métodos utilizando mínimos quadrados.	87
Figura 3.47	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção senoidal. Métodos com abordagem <i>cell-based</i>	88
Figura 3.48	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção senoidal. Métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	89
Figura 3.49	Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção senoidal. Métodos utilizando mínimos quadrados.	89

Figura 3.50	Distribuição do erro na malha regular com 232 volumes de controle utilizando GGCBW_2S.	91
Figura 3.51	Distribuição do erro na malha com distorção senoidal com 232 volumes de controle e utilizando GGCBW_2S.	91
Figura 3.52	Distribuição do erro na malha com distorção aleatória com 232 volumes de controle utilizando GGCBW_2S.	92
Figura 3.53	Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método GGCBW_1S. ...	93
Figura 3.54	Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método GGCBW_2S. ...	93
Figura 3.55	Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método GGVBPL.	94
Figura 3.56	Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método LSSID.	94
Figura 3.57	Tempo de inicialização considerando os métodos com abordagem <i>cell-based</i>	98
Figura 3.58	Tempo de reconstrução considerando os métodos com abordagem <i>cell-based</i>	98
Figura 3.59	Tempo de inicialização considerando os métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	99
Figura 3.60	Tempo de reconstrução considerando os métodos com abordagem <i>vertex-based</i>	100
Figura 3.61	Tempo de inicialização considerando os métodos que utilizam mínimos quadrados.	101
Figura 3.62	Tempo de reconstrução considerando os métodos que utilizam mínimos quadrados.	101
Figura 4.1	Volumes de controle que participam da equação aproximada associada a p.	106
Figura 4.2	Representação de um volume de controle e disposição do novo sistema coordenado (ξ, η)	108
Figura 4.3	Decomposição do vetor \mathbf{e}_ξ no sistema cartesiano.	109

Figura 4.4	Eixo coordenado ξ e centroides p e f.	110
Figura 4.5	Entidades envolvidas na determinação do fluxo em uma face interna.	112
Figura 4.6	Duas situações possíveis para transformação dos sistemas coordenados.	114
Figura 4.7	Transformação dos sistemas coordenados para o caso em que as projeções verticais dos vetores $\mathbf{r}_{p,n}$ e da área face são maiores que as projeções horizontais.	115
Figura 4.8	Volume de controle adjacente a uma fronteira.	117
Figura 5.1	Domínio com as condições de contorno do caso 1. Malha regular.	123
Figura 5.2	Convergência da pressão nas malhas regulares. Caso 1. ...	123
Figura 5.3	Convergência da pressão considerando LSSID. Caso 1. ...	125
Figura 5.4	Comparação entre a pressão obtida com as soluções analítica e numérica na malha RE com 2232 volumes de controle.	125
Figura 5.5	Convergência do gradiente considerando LSSID. Caso 1. ...	126
Figura 5.6	Convergência da pressão considerando valores do parâmetro γ entre 1 e 10000.	127
Figura 5.7	Convergência da pressão considerando valores de γ unitário e menor que a unidade.	128
Figura 5.8	Problema rotacionado. Domínio discretizado com a malha regular.	129
Figura 5.9	Convergência da pressão considerando valores de γ entre 1 e 0.0001. Problema rotacionado.	129
Figura 5.10	Convergência da pressão considerando valores de γ entre 1 e 100. Problema rotacionado.	130
Figura 5.11	Convergência da pressão considerando o esquema totalmente implícito nas malhas DS e RA.	131
Figura 5.12	Domínio físico com as condições de contorno do caso 2. .	132
Figura 5.13	Convergência da pressão nas malhas regulares. Caso 2. ...	133

Figura 5.14	Convergência da pressão nas malhas RE, NC e DA. Método LSSID, caso 2.	134
Figura 5.15	Convergência do gradiente de pressão nas malhas RE, NC e DA. Método de reconstrução LSSID, caso 2.	135
Figura A.1	Elementos geométricos envolvidos no procedimento de pseudolaplaciano.	146
Figura B.1	Superfície plana com representação das coordenadas de seu centroide.	152

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Informações sobre as malhas regulares, com distorção aleatória e com distorção senoidal.	54
Tabela 3.2	Informações sobre as malhas não-conformes.	54
Tabela 3.3	Informações sobre as malhas com razão de aspecto alta...	55
Tabela 3.4	Significado das siglas referentes aos métodos de reconstrução do gradiente.	58
Tabela 3.5	Significado das siglas referentes às malhas.	58
Tabela 3.6	Coordenadas e valores de pressão em alguns pontos associados ao volume de controle no canto inferior esquerdo..	65
Tabela 3.7	Coordenadas e valores de pressão em alguns pontos associados ao volume de controle no canto superior esquerdo.	65
Tabela 3.8	Valores da constante a e da ordem de convergência b obtidos nas malhas regulares, com distorção aleatória e senoidal.....	90
Tabela 5.1	Especificação dos casos considerados.....	121

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos latinos

P	Pressão
\mathbb{K}	Tensor permeabilidade
S	Superfície
A	Coefficiente da equação discretizada
V	Volume
q	Fluxo de massa injetado ou produzido por unidade de volume de reservatório
Q	Fluxo de massa injetado ou produzido
\mathbf{v}	Vetor velocidade
x, y	Coordenadas do sistema cartesiano ou global
h	Comprimento característico dos volumes de controle da malha
a	Constante relacionada à determinação da norma do erro do gradiente
b	Ordem de convergência relacionada à determinação da norma do erro do gradiente

Símbolos gregos

$\Delta \mathbf{S}_f$	Vetor área de uma face
φ	Variável genérica
ΔV	Volume de um volume de controle
μ	Viscosidade dinâmica

ρ	Massa específica
ξ, η	Coordenadas do sistema local
ϕ	Porosidade
Ω	Domínio de uma solução
α	Constante relacionada à determinação do tempo computacional
β	Ordem relacionada à determinação do tempo computacional
γ	Razão de anisotropia

Subscritos

p	Volume de controle qualquer da malha
v	Vértice da malha
f	Centroide da face

Sobrescritos

num	Numérico
a	Analítico
n	Nível iterativo atual
$n - 1$	Nível iterativo anterior ao analisado

Símbolos especiais

\mathbb{A}	Representação de uma matriz
∇	Operador nabla
$f \in p$	Faces pertencentes ao volume de controle p
$\partial_{\xi}, \partial_{\eta}$	Derivada parcial de primeira ordem com relação às coordenadas locais
∂_x, ∂_y	Derivada parcial de primeira ordem com relação às coordenadas cartesianas
N_c	Número de volumes de controle da malha

N_{vc}	Número de volumes de controle que cercam um dado volume de controle
N_v	Número de volumes de controle que cercam um dado vértice
N_{fi}	Número de faces internas de uma malha
N_{ff}	Número de faces de fronteira de uma malha
N_{ve}	Número de vértices de uma malha
β_f	Fator de ponderação referente aos métodos de reconstrução do gradiente com abordagem <i>cell-based</i>
w_k	Fator de ponderação referente aos métodos de reconstrução do gradiente com abordagem <i>vertex-based</i>
λ_k	Fator de ponderação referente aos métodos de reconstrução que empregam mínimos quadrados
ε_i	Erro de aproximação do gradiente em um volume de controle
ε_{grad}	Norma do erro do gradiente em uma determinada malha
ε_p	Norma do erro da pressão em uma determinada malha
δ_{PI}	Norma da variação do campo de pressão entre duas iterações consecutivas

RESUMO

Uma estratégia especial para a discretização de reservatórios de petróleo encontrada na literatura tem por princípio manter o uso das tradicionais malhas *corner-point* nas regiões afastadas dos poços e empregar malhas cilíndricas ao redor destes. A necessária conexão entre estes dois tipos de malhas é sugerida ser feita através de malhas de transição, cuja característica principal é apresentar volumes de controle genéricos com um número arbitrário de faces. Dando ênfase a este tipo de malhas, também denominadas na literatura por malhas poligonais, o presente trabalho tem como foco o estudo, a implementação e a análise de métodos de reconstrução explícita do gradiente nelas empregados. Os métodos de reconstrução têm como tarefa fundamental determinar os vetores gradiente associados a todos os volumes de controle de uma malha poligonal através de valores discretos de pressão, associados aos centroides desses volumes. Tais métodos podem ser divididos em dois grandes grupos: um deles se utiliza da fórmula de Green-Gauss, derivada do teorema da divergência, e o outro emprega os princípios do método dos mínimos quadrados. Testes em diferentes tipos de malhas poligonais e considerando diferentes funções, cada uma representando um campo de pressão ao longo do domínio, são realizados com o intuito de determinar quais métodos de reconstrução apresentam os melhores resultados numéricos e tempos computacionais razoáveis para serem executados. Os resultados numéricos são analisados de acordo com a ordem de convergência do gradiente de pressão e também de acordo com a magnitude da norma do erro deste gradiente. A determinação daqueles métodos que melhor desempenham a sua função e apresentam uma boa relação custo/benefício é importante para os esquemas numéricos que se utilizam do resultado do gradiente para aproximar os fluxos através das faces dos volumes de controle poligonais. Um esquema numérico que emprega o princípio anterior é também apresentado neste trabalho. Dois casos são testados com o intuito de avaliar a metodologia numérica proposta.

ABSTRACT

A special strategy for petroleum reservoir discretization found in the literature is based on the principle of maintain the use of the traditional corner-point grids in the regions away from the wells and employ cylindrical grids around them. The connection between these two types of grids is suggested to be made using transitional grids whose main characteristic is to be formed by control volumes with an arbitrary number of faces. This kind of grids is mostly known in the literature as polygonal grids. This work focuses on the study, the implementation, and the analysis of explicit gradient reconstruction methods employed with those grids. The purpose of these methods is to approximate the gradient vectors associated with all the control volumes of a polygonal grid using discrete values of pressure, localized at control volume centroids. The methods belong to two main groups: one of them uses the Green-Gauss formula, derived from the divergence theorem, and the other one employs the least squares method. Tests on different types of polygonal grids and considering different functions, each one representing a pressure field in the domain, are performed in order to determine the gradient reconstruction methods that give more accurate numerical results in reasonable computational times. The numerical results are analyzed according to the convergence order of the pressure gradient and also according to the magnitude of the gradient error norm. The determination of the methods that show a good cost/benefit ratio is important for numerical schemes that need gradients for approximating the mass-flow through the control volumes interfaces. A numerical scheme applying gradient reconstruction methods to a single-phase flow model is also presented in this work. Two cases are tested in order to evaluate the numerical methodology proposed.

INTRODUÇÃO

1.1 Preliminares

O petróleo a ser explotado através de poços é encontrado em uma rocha denominada de rocha-reservatório, que possui a característica de apresentar em seu interior espaços vazios interconectados denominados de poros. Sendo o reservatório composto por uma rocha porosa, a modelagem física do escoamento de fluidos em seu interior é usualmente descrita pela lei de Darcy, que para um primeiro momento pode ser entendida como a relação entre a velocidade do fluido, o gradiente de pressão que promove o escoamento e as propriedades da rocha e do fluido.

Devido à crescente necessidade de se fazer previsões realísticas de diversos processos físicos e graças ao crescimento da tecnologia dos computadores, as simulações numéricas têm se tornado cada vez mais importantes e comuns. No caso de um reservatório de petróleo, os simuladores numéricos são capazes de fazer previsões da produção ao longo do tempo e informar sobre o desempenho de acordo com o esquema de produção adotado. Graças a isso, as condições ótimas de exploração do reservatório podem ser determinadas. De uma maneira mais específica, através da simulação numérica pode ser analisado o comportamento de um reservatório sujeito à injeção de diferentes fluidos (água e gás, por exemplo) e a diferentes vazões, bem como pode ser determinado o efeito da localização de poços e do espaçamento entre eles na recuperação final de óleo e/ou gás [34].

Os simuladores numéricos são baseados em modelos matemáticos que descrevem o fenômeno físico em análise, e utilizam diversos métodos numéricos para resolver as equações diferenciais parciais que geralmente encontram-se em tais modelos. Essas equações diferenciais são resolvidas numericamente em um domínio discretizado substituindo-se as referidas equações por um conjunto de equações algébricas que envolvem as variáveis em questão [25]. A discretização do domínio de solução é um processo que consiste na divisão deste em um número finito de blocos menores aos quais se associam valores discretos das variáveis. O conjunto destes blocos, chamados de volumes de controle no caso do método dos volumes finitos ¹, utilizado neste trabalho, forma a malha computacional [17].

Nos primórdios da simulação numérica de reservatórios, a geometria de um reservatório era discretizada de maneira simplificada, utilizando as malhas cartesianas. Contudo, com a necessidade de representar esta geometria de uma maneira mais realística, malhas com uma maior flexibilidade começaram a ser utilizadas. As malhas, denominadas de *corner-point*, são atualmente as mais empregadas nos *softwares* comerciais de simulação de reservatórios. Essas malhas são malhas estruturadas ² formadas por blocos hexaédricos em que as coordenadas de cada um dos vértices que os definem podem ser especificadas individualmente. O seu uso está enraizado na comunidade técnica e científica envolvida na simulação de reservatórios e por isso tentativas de utilização de outros tipos de malhas esbarram em dificuldades adicionais, como por exemplo, o fato de todas as ferramentas de pré-processamento estarem implementadas considerando esse tipo de representação discreta para os reservatórios. Na simulação de reservatórios, normalmente são utilizados métodos numéricos *cell-centered* os quais se caracterizam por associar as variáveis discretas ao centro geométrico dos blocos [28].

A desvantagem das malhas *corner-point* é que quando as estruturas geológicas apresentam formas muito complicadas, elas só conseguem realizar uma representação muito grosseira da geometria. Em [26] são apresentadas as construções e características de oito tipos de malhas *corner-point*. A figura 1.1 ilustra três tipos comuns destas malhas.

Buscando-se uma maior versatilidade na discretização de domínios

¹Todo método numérico que satisfaz a conservação de uma propriedade (massa, energia, por exemplo) em nível de volumes de controle é um método de volumes finitos [25].

²Malhas que necessitam obedecer uma estrutura preestabelecida.

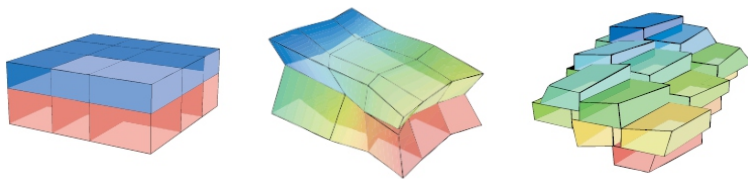


Figura 1.1 – Exemplos de malhas *corner-point* extraídas de [26].

complexos, as malhas não-estruturadas, muito utilizadas em diversos problemas de engenharia, passaram também a ser utilizadas em alguns problemas de simulação de reservatórios. A adaptação à geometria do reservatório bem como o refinamento em regiões específicas podem ser alcançados com maior facilidade empregando-se esse tipo de malhas [25]. A discretização as utilizando pode ser realizada através de triângulos (tetraedros para o caso 3D), quadriláteros (hexaedros em 3D) ou ainda pode-se partir para uma discretização mista onde tanto triângulos quanto quadriláteros são empregados.

1.2 Motivação

O escoamento de fluidos nas proximidades dos poços apresenta um comportamento diferente daquele encontrado no restante do reservatório. Tratam-se de regiões muito importantes que merecem uma atenção. Uma forma especial de discretização para essas regiões, proposta como parte de um projeto de pesquisa e desenvolvimento (P&D) em execução no SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor e inserido na Rede Temática de Simulação e Gerenciamento de Reservatórios, motivou a realização deste trabalho. A referida discretização segue propostas encontradas em [7, 31] sendo que as figuras 1.2 e 1.3 ilustram a estratégia adotada para o caso 3D e 2D respectivamente.

De acordo com tal proposta, primeiramente discretiza-se o reservatório com uma malha *corner-point* convencional, da mesma maneira feita tradicionalmente. Definida a trajetória dos poços, eliminam-se da malha original os blocos interceptados por eles e também alguns vizinhos, formando-se cavidades que necessitam ser preenchidas.

A fim de preencher tais espaços vazios, na região em torno dos poços geram-se malhas cilíndricas. Este tipo de malhas é empregado devido

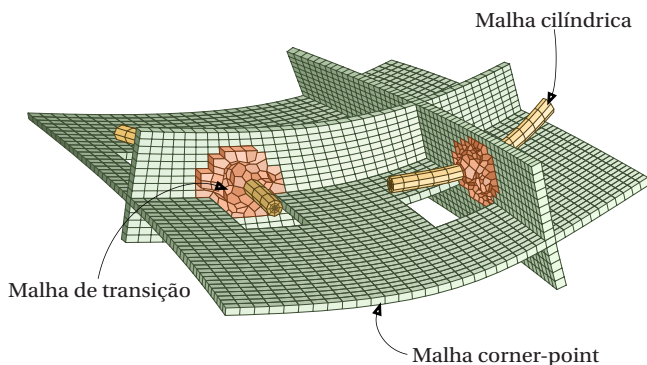


Figura 1.2 – Ilustração em 3D da forma especial de discretização de um reservatório. Modificada de [27].

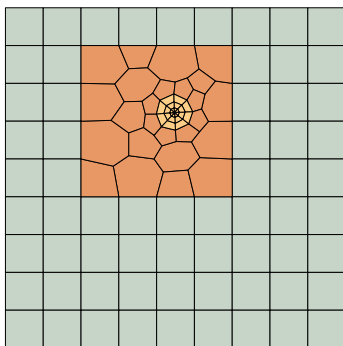


Figura 1.3 – Ilustração em 2D da forma especial de discretização. Malha poligonal está apresentada na cor laranja.

ao comportamento radial do escoamento nas proximidades dos poços, tornando mais preciso o cálculo do fluxo de massa através das faces dos volumes de controle. Além disso, existe a possibilidade de refinamento destas malhas de tal maneira que se pode captar os elevados gradientes de pressão característicos de tal região. A utilização das malhas cilíndricas não preenche por completo a cavidade gerada devido à eliminação de alguns dos blocos da malha *corner-point*. Existe então a necessidade de preencher os espaços entre os blocos da malha original e as malhas cilíndricas.

Os espaços restantes são completados com as chamadas malhas de transição que apresentam volumes de controle capazes de se adaptar à geometria dos referidos espaços, que em geral é intrincada. Tal adaptação é possível já que tais malhas apresentam volumes de controle genéricos cujo número de faces é arbitrário. Sendo assim, devido às características das malhas de transição, elas serão designadas neste trabalho por malhas poligonais, denominação convencional encontrada na literatura.

Deve ficar claro que apesar da motivação estar relacionada com uma nova estratégia para a discretização de reservatórios de petróleo, o foco deste trabalho está no estudo, na implementação e na análise de métodos de reconstrução do gradiente de pressão empregados nas malhas poligonais. Os resultados obtidos mediante tais métodos são utilizados em um esquema numérico para aproximar os fluxos através das faces dos volumes de controle das referidas malhas. Tal esquema é objeto de estudo no projeto P&D comentado, sendo assim, o presente trabalho deve ser encarado como o primeiro passo para que a discretização sugerida no referido projeto seja realmente possível.

Vale destacar que para o desenvolvimento deste trabalho foram empregadas as ferramentas disponíveis nas bibliotecas Orion criadas no projeto citado. Com estas bibliotecas é possível, por exemplo, obter toda a representação computacional das malhas poligonais (geometria, topologia) e dados geométricos como áreas, centroides de faces e volume dos volumes de controle.

1.3 Objetivos e contribuições

O presente trabalho tem como objetivo principal analisar métodos de reconstrução explícita do gradiente de pressão a fim de determinar quais deles são mais apropriados para se fazer a aproximação de fluxos nas malhas poligonais. Para isto é de suma importância:

- Apresentar os princípios dos referidos métodos de reconstrução do gradiente e avaliar os seus desempenhos procurando identificar aqueles que apresentam a melhor relação custo/benefício;
- Apresentar e avaliar o esquema numérico proposto para aproximação dos fluxos nas referidas malhas poligonais.

A ideia é contribuir para o avanço nos estudos do acoplamento poço-reservatório, considerando uma discretização ainda pouco usual na área

de simulação de reservatórios. Tal discretização, conforme comentado anteriormente, possibilita o refinamento da malha nas regiões próximas ao poço objetivando captar os elevados gradientes de pressão ali presentes, calcular os fluxos de forma mais precisa nas referidas regiões e por consequência obter uma previsão mais precisa da produção dos poços.

1.4 Malhas poligonais

Uma seção especial para este tipo de malha é aqui apresentada por serem estas as analisadas neste trabalho. Conforme seu próprio nome indica, tais malhas são formadas por volumes de controle poligonais sendo os métodos numéricos nelas empregados do tipo *cell-centered*.

As malhas tetraédricas e estruturadas hexagonais têm sido usadas por décadas na maioria das simulações numéricas de engenharia, sendo assim possuem um grande acervo de métodos numéricos possíveis de serem empregados. Atualmente o uso de malhas não-estruturadas poligonais (poliédricas para o caso 3D) para discretização de domínios físicos está se tornando mais comum, surgindo-se a necessidade de métodos de discretização gerais que não apresentam restrições com relação ao número de faces dos volumes de controle [28].

Na simulação de reservatórios as malhas poligonais/poliédricas podem se adaptar às complexas características geométricas que podem apresentar os reservatórios [10]. Algumas vantagens destas malhas com relação a outros tipos de malhas são aqui apresentadas de acordo com [21] e [14]:

- Os volumes de controle poligonais/poliédricos possuem uma maior conectividade com seus vizinhos. Este fato geralmente melhora a convergência da solução comparando-se com a observada em malhas não-estruturadas formadas por volumes simples, como triângulos e tetraedros, por exemplo;
- Menor número global de volumes de controle em relação às malhas não-estruturadas simples de triângulos ou tetraedros, para uma solução com precisão equivalente;
- Facilidade de fazer o refino local adaptativo;
- Possibilidade de obtenção através da conversão de malhas não-estruturadas de triângulos ou tetraedros;

- Devido à sua generalidade, outros tipos de malhas, incluindo as *corner-point*, podem ser consideradas casos particulares de malhas poligonais ou poliédricas [27].

Como o objetivo deste trabalho não está focado na geração das malhas poligonais e sim em um esquema numérico para tratá-las, procurou-se a alternativa mais acessível para obtê-las. Sua obtenção é possível através de uma sequência de operações envolvendo diferentes *softwares*, detalhadamente apresentada em [28], porém, sendo aqui descrita de forma sucinta. Primeiramente, através de uma determinada geometria gera-se uma malha não-estruturada convencional utilizando-se o Icem [5]. O conjunto, malha e geometria, é exportado em um formato possível de ser lido no Fluent [4] onde a malha não-estruturada é convertida em malha poliédrica. Deve-se ressaltar que somente as malhas tridimensionais são possíveis de serem convertidas no referido *software* comercial.

A malha poliédrica obtida é assim exportada no formato Enight Gold, podendo ser lida pela biblioteca especializada de entrada e saída de malhas que forma parte das bibliotecas Orion. O domínio discretizado pela malha poliédrica é definido de tal forma que uma das fronteiras da malha, formada por polígonos, possa ser extraída e utilizada como malha poligonal. Esse processo de extração é realizado também utilizando uma rotina implementada nas bibliotecas Orion.

A malha poligonal obtida pode também ser exportada no formato Enight Gold, que é o formato padrão utilizado pelo *software* de visualização Enight [11]. Nesse *software* tanto a malha como os campos escalares e vetoriais a ela associados podem ser visualizados e analisados.

As malhas poligonais são compostas por diferentes entidades geométricas. Os volumes de controle, entidades de dimensão maior das malhas, são polígonos planos limitados por um número arbitrário de faces. Em duas dimensões, as faces são retas determinadas por dois vértices. Na figura 1.4 estão ilustradas cada uma das entidades citadas.

Notação utilizada

Nesta seção descreve-se a notação utilizada neste trabalho a fim de simbolizar as entidades geométricas associadas às malhas poligonais.

Um volume de controle qualquer será designado por p , sendo o seu centroide também assim denominado. O centroide é um ponto impor-

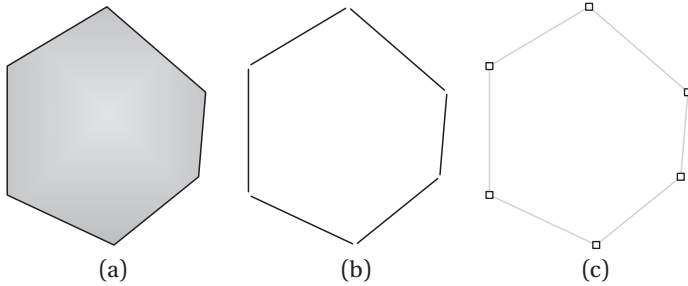


Figura 1.4 – Entidades envolvidas nas malhas poligonais: (a) Volume de controle, (b) Faces e (c) Vértices.

tante já que o valor da variável pressão associado ao volume de controle estará ali representado. Quando uma face isolada for analisada sua representação será dada por f . Entretanto, quando todas as faces de um volume de controle forem consideradas, na representação anterior adicionar-se-á o subíndice k , cujo valor varia de 1 até o número de faces do volume de controle em questão, como ilustrado na figura 1.5. Como mostra essa figura, os índices associados a essas faces não precisam estar ordenados. O valor de pressão associado a uma face será aquele avaliado no seu centroide. O centroide de uma face será também designado por f .

Em alguns dos métodos a serem discutidos posteriormente o valor da variável pressão na face é obtido considerando-se os dois volumes de controle que a tem em comum. A fim de diferenciá-los, um dos volumes será designado por p e o outro por n conforme pode ser visto na figura 1.6.

Um vértice de uma malha será representado por v . Em alguns dos métodos a serem apresentados haverá a necessidade de associar o valor de pressão em um vértice aos valores nos volumes de controle que o cercam. Tais volumes de controle serão designados por p_k com $k = 1, 2, \dots, N_v$ sendo N_v o número de volumes de controle cercando o dado vértice. A figura 1.7 mostra um exemplo da configuração comentada. Como cada face de uma malha poligonal contém apenas dois vértices, estes serão representados simplesmente por v_1 e v_2 .

Os volumes de controle vizinhos a um dado volume de controle p serão denominados por n_k com $k = 1, 2, \dots, N_{vc}$ sendo N_{vc} o número de volumes de controle vizinhos a p . A numeração dos vizinhos é realizada de acordo com a numeração das faces de p . Um volume de controle e seus vizinhos são representados na figura 1.8.

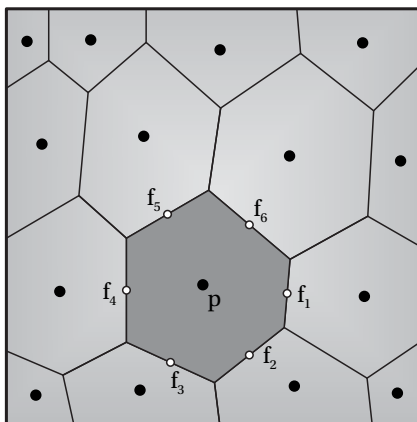


Figura 1.5 – Representação de uma malha poligonal com destaque para volume de controle p e suas faces.

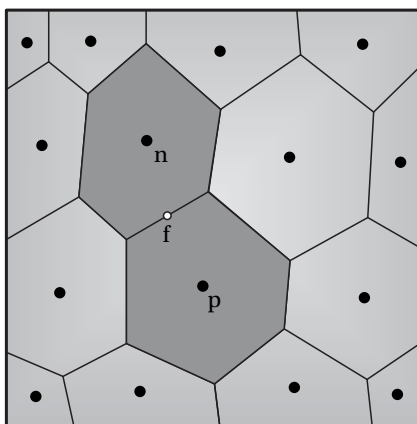


Figura 1.6 – Representação de uma malha poligonal com ênfase nos dois volumes de controle vizinhos que possuem a face f em comum.

1.5 Problema físico

Nesta seção é apresentado o modelo matemático que descreve o deslocamento monofásico de um fluido através de um meio poroso. Alguns conceitos envolvidos nas equações são também expostos. Deve ser ressaltado que um problema bidimensional é considerado neste trabalho.

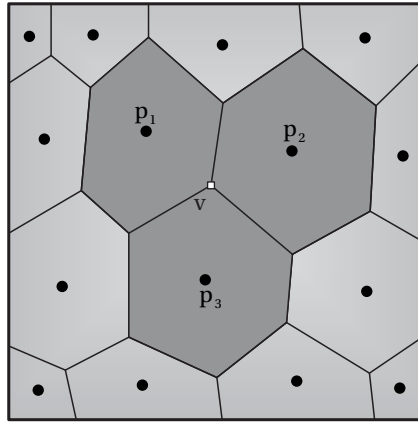


Figura 1.7 – Notação empregada para um vértice em uma malha poligonal e dos volumes de controle que o cercam.

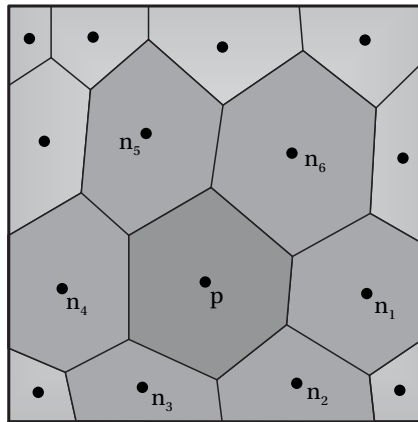


Figura 1.8 – Notação utilizada para os vizinhos de um volume de controle p .

As hipóteses adotadas para o modelo monofásico bidimensional são:

1. Escoamento monofásico e isotérmico num plano horizontal;
2. Meio poroso consolidado ³, anisotrópico e homogêneo;
3. Fluido de massa específica e viscosidade constantes.

³As propriedades de um meio poroso consolidado (como permeabilidade e porosidade por exemplo) não variam com o tempo.

Descrição macroscópica

A análise do escoamento em meios porosos pode ser realizada de acordo com a descrição micro e macroscópica. O meio poroso pode ser considerado um emaranhado de canais (poros), interconectados ou não, por onde o fluido escoar. Utilizando a descrição microscópica, as equações diferenciais de conservação da massa e quantidade de movimento são empregadas para descrever o movimento dos fluidos no interior desses canais, sendo assim necessário conhecer os seus formatos bem como as suas conectividades [2]. Devido à grande dificuldade de se obter estas informações aliada com o grande número de poros presente no meio e o elevado custo computacional para a solução das equações diferenciais, torna-se impraticável o uso da descrição microscópica com o objetivo de descrever o escoamento considerando uma escala cuja ordem de grandeza for maior que a escala dos poros [17].

A descrição macroscópica é então utilizada na simulação de reservatórios de petróleo. Um detalhamento dos poros do meio não é aqui necessário sendo as grandezas físicas envolvidas no escoamento consideradas como variáveis contínuas, definidas em todo espaço ocupado pelo meio. Os valores destas variáveis representam na realidade uma média volumétrica dos valores microscópicos considerando-se uma certa quantidade de poros [17].

Das propriedades envolvidas na descrição macroscópica, a porosidade é classificada como uma grandeza volumétrica, sendo sua definição proveniente da definição de média volumétrica. Já a permeabilidade absoluta é classificada como grandeza relativa ao escoamento pois sua definição está estritamente relacionada com a passagem do fluido através do meio poroso. Devido à importância, estas duas propriedades são definidas a seguir.

Porosidade

Porosidade é a medida da capacidade de armazenamento de fluidos em uma dada rocha [1]. Quantitativamente ela é definida como a razão entre o volume vazio (ou volume poroso) e o volume total

$$\phi = \frac{V_v}{V_T} = \frac{V_v}{V_v + V_s} \quad (1.1)$$

onde V_v é o volume vazio e V_s o volume ocupado pela matriz sólida.

Conceitos estatísticos e matemáticos são aplicados para se obter a distribuição da porosidade em um reservatório. Para isto são realizadas medições em várias amostras do meio poroso retiradas de diversos poços perfurados no reservatório.

Permeabilidade absoluta

Permeabilidade absoluta (ou simplesmente permeabilidade) é a propriedade de um meio poroso que mede a sua capacidade de transmitir fluidos, ou, ainda, é uma medida da condutividade de fluidos.

Essa propriedade é definida matematicamente pela lei de Darcy [1]

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbb{K}}{\mu} \nabla P \quad (1.2)$$

sendo \mathbf{v} a velocidade de Darcy, P a pressão, μ a viscosidade absoluta do fluido e \mathbb{K} o tensor permeabilidade [17]. Vale ressaltar que a lei de Darcy é amplamente utilizada em simulações de reservatórios e o modelo apresentado é destinado a descrever o escoamento monofásico num plano horizontal, por isso os efeitos gravitacionais estão sendo desconsiderados.

A lei de Darcy é aplicada somente nas regiões de escoamento laminar, tendo o gradiente de pressão um comportamento diferente do apresentado quando a velocidade do fluido é maior (escoamento turbulento). Felizmente, para escoamentos em reservatórios a lei de Darcy é válida [12], substituindo no nível macroscópico a equação da conservação de quantidade de movimento.

Conforme já mencionado, a permeabilidade apresentada na equação (1.2) é representada normalmente como um tensor simétrico de segunda ordem. Considerando o sistema cartesiano e um caso bidimensional, essa propriedade pode ser expressa por

$$\mathbb{K} = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{xy} & K_{yy} \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Se o meio poroso for isotrópico, o tensor permeabilidade torna-se

$$\mathbb{K} = \begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & K \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

podendo assim a propriedade ser representada por uma grandeza escalar (K). No Sistema Internacional (SI), a unidade da permeabilidade é (m^2), porém, na indústria petrolífera é comumente utilizado o *Darcy*⁴ (D), ou, ainda, o *miliDarcy*⁵ (mD).

Equação fundamental do modelo

O escoamento de fluidos através de um meio poroso é governado pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia da mesma maneira que o escoamento através de um duto ou uma tubulação. Contudo, conforme comentado anteriormente, quando se utiliza a descrição macroscópica, a lei de Darcy é empregada substituindo a equação de conservação de quantidade de movimento e sendo o escoamento tratado como isotérmico, a equação de conservação de energia não é utilizada. Assim, para descrever o tipo de escoamento considerado neste trabalho, somente é necessário aplicar a equação da conservação da massa em conjunto com a lei de Darcy.

A equação da conservação da massa na sua forma diferencial para o caso de escoamento monofásico apresentando um termo fonte q pode ser encontrada em [6]

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) + q \quad (1.5)$$

sendo ρ a massa específica do fluido e q o fluxo de massa produzido ou injetado por unidade de volume do reservatório (sinal positivo para injeção e negativo para produção). As demais grandezas físicas que aparecem na referida equação foram recém definidas.

Lembrando que, segundo as hipóteses realizadas no início desta seção, o meio poroso analisado é consolidado e o fluido apresenta massa específica constante. Tais considerações fazem com que o termo temporal da equação (1.5) deixe de existir resumindo-se a equação da conservação da massa a

$$\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = q \quad (1.6)$$

Como a viscosidade do fluido também é considerada constante, ao substituir a lei de Darcy na equação anterior chega-se a

⁴ $1D = 9,86923 \times 10^{-13} \text{ m}^2$

⁵ $1mD = 10^{-3} D$

$$-\nabla \cdot (\mathbb{K} \nabla P) = \frac{q\mu}{\rho} \quad (1.7)$$

A equação resultante é uma equação de segunda ordem na pressão que em conjunto com as condições de contorno, a serem definidas de acordo com o problema a ser modelado, define como ocorre o escoamento do óleo através do reservatório. Deve-se resolver numericamente esta equação a fim de se obter os campos de pressão no domínio físico em questão.

O modelo monofásico bidimensional permanente utilizado neste trabalho é simplificado, contudo espera-se obter resultados coerentes com a física envolvida no problema. Vale a pena destacar que a equação (1.7) é o núcleo da maioria dos modelos empregados na simulação de reservatórios pois o termo $\nabla \cdot (\mathbb{K} \nabla P)$, ou uma variante dele, aparece em todos eles [27]. A discretização de um modelo de escoamento em meios porosos encontra como grande desafio discretizar o referido termo.

Deve-se salientar também que as simplificações adotadas são válidas já que o enfoque do trabalho é a análise dos métodos de reconstrução do gradiente (a serem discutidos no próximo capítulo) a fim de realizar a aproximação dos fluxos nas malhas poligonais.

1.6 Organização do trabalho

Este trabalho está dividido em 6 capítulos incluindo o presente introdutório e a conclusão.

O capítulo 2 é dedicado aos métodos de reconstrução explícita do gradiente de pressão considerados. Todas as expressões envolvidas são demonstradas com o objetivo de deixar o mais clara possível a forma de se aproximar o gradiente a partir dos valores discretos da pressão.

Com o intuito de avaliar os métodos apresentados, no capítulo 3, testes são realizados em diferentes tipos de malhas poligonais e considerando diferentes campos de pressão. Comparando os resultados dos métodos de reconstrução do gradiente com expressões analíticas, procura-se nesse capítulo determinar quais métodos apresentam maior precisão. Além disso, são comparados também os tempos de computação, a fim de determinar se existe algum método que combine boa precisão com tempos de computação reduzidos.

O capítulo 4 descreve como é realizada a discretização da equação

diferencial da pressão para escoamento monofásico, aplicando os gradientes de pressão reconstruídos. O esquema numérico empregado para se determinar os fluxos através das malhas poligonais é também evidenciado.

Finalmente, o capítulo 5 é dedicado a apresentar resultados referentes a problemas-teste empregando as aproximações realizadas nos capítulos anteriores.

MÉTODOS DE RECONSTRUÇÃO EXPLÍCITA DO GRADIENTE

2.1 Introdução

A fim de se calcular os fluxos de massa através das faces dos volumes de controle poligonais empregando o esquema numérico proposto no presente trabalho (a ser apresentado nos próximos capítulos), é necessário determinar valores dos gradientes de pressão associados aos volumes de controle. Assim, neste capítulo são descritos diferentes métodos propostos na literatura para realizar essa tarefa. Vale a pena destacar que tais métodos são denominados aqui de reconstrução explícita do gradiente por empregar valores discretos de pressão já conhecidos de um nível iterativo anterior ao corrente. O processo iterativo será também detalhado nos próximos capítulos.

Os métodos de reconstrução do gradiente podem ser divididos em dois grandes grupos: um deles realiza a reconstrução do gradiente aplicando a fórmula de Green-Gauss, e o outro aplicando o método dos mínimos quadrados. A classificação, vista de uma maneira geral, é demonstrada na figura 2.1.

A tarefa fundamental destes métodos é fornecer os vetores gradiente associados a todos os volumes de controle de uma malha a partir dos valores discretos de uma variável escalar, a pressão no caso considerado. Uma vez que o trabalho considera um método de discretização *cell-centered*, os

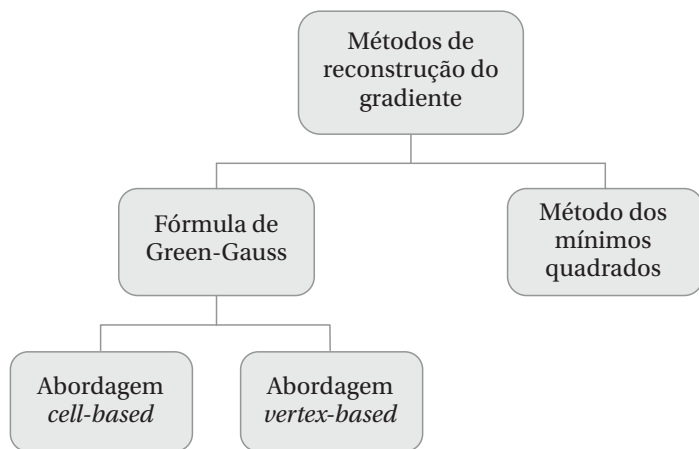


Figura 2.1 – Diagrama ilustrativo dos métodos de reconstrução do gradiente empregados.

valores discretos da pressão estão associados aos centroides dos volumes de controle. A figura 2.2 ilustra a representação da aplicação dos métodos.

A seguir são apresentados os princípios dos métodos de reconstrução explícita do gradiente que utilizam a fórmula de Green-Gauss.

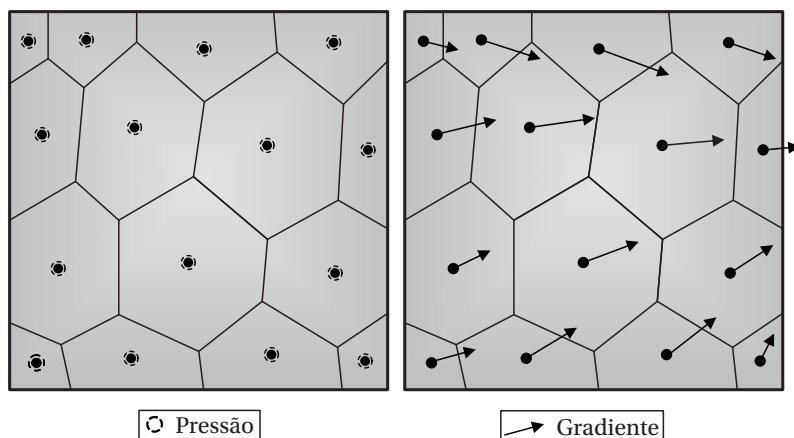


Figura 2.2 – Esquema ilustrativo da aplicação dos métodos de reconstrução do gradiente.

2.2 Fórmula de Green-Gauss

Considerando um volume de controle V como sendo uma região arbitrária fechada e delimitada por uma superfície S , conforme ilustrado na figura 2.3, é possível aplicar o teorema da divergência, também denominado de teorema de Gauss [9]

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{A} \, dV = \int_S \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} \quad (2.1)$$

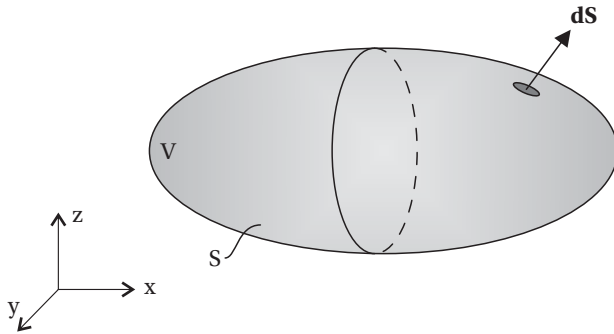


Figura 2.3 – Representação de um volume no qual é possível utilizar o teorema da divergência.

Na equação (2.1) \mathbf{A} representa um determinado campo vetorial cujas derivadas parciais de primeira ordem são contínuas, $d\mathbf{S}$ é o vetor diferencial de área, normal à superfície S e que aponta para fora do volume de controle e dV é o elemento diferencial de volume. O teorema da divergência afirma que a integral volumétrica do divergente do campo vetorial \mathbf{A} ao longo de um volume arbitrário V é igual ao fluxo desse campo através da superfície S que o delimita [33].

Sendo φ um escalar e \mathbf{c} um vetor constante não-nulo ($\mathbf{c} \neq \mathbf{0}$), ao se assumir que $\mathbf{A} = \varphi \mathbf{c}$, a equação (2.1) pode ser escrita por

$$\int_V \nabla \cdot (\varphi \mathbf{c}) \, dV = \int_S \varphi \mathbf{c} \cdot d\mathbf{S} \quad (2.2)$$

Aplicando identidades envolvendo o operador diferencial nabla [9], a

seguinte simplificação é possível

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\varphi \mathbf{c}) &= \varphi \nabla \cdot \mathbf{c} + \nabla \varphi \cdot \mathbf{c} \\ &= \nabla \varphi \cdot \mathbf{c}\end{aligned}\quad (2.3)$$

já que \mathbf{c} é constante, e portanto, $\nabla \cdot \mathbf{c} = 0$. Considerando tal simplificação e de acordo com a propriedade comutativa do produto escalar, a equação (2.2) toma a seguinte forma

$$\mathbf{c} \cdot \int_V \nabla \varphi \, dV = \mathbf{c} \cdot \int_S \varphi \, d\mathbf{S} \quad (2.4)$$

Sendo \mathbf{c} um vetor não-nulo, a condição a seguir deve ser satisfeita

$$\int_V \nabla \varphi \, dV = \int_S \varphi \, d\mathbf{S} \quad (2.5)$$

A equação anterior é uma forma particular do teorema de Gauss que permite determinar o valor do gradiente de uma variável escalar em uma certa região fechada. Para um volume de controle poligonal, a integral de superfície nela aparente pode ser expressa através da propriedade de aditividade das integrais [17] como o somatório de integrais sobre todas as faces que delimitam o volume de controle. Logo, a equação (2.5) pode ser escrita

$$\int_{\Delta V} \nabla \varphi \, dV = \sum_f \int_{\Delta S_f} \varphi \, d\mathbf{S} \quad (2.6)$$

sendo ΔS_f a área da face constituinte do referido volume de controle poligonal e ΔV o volume deste.

Considerando que o gradiente da variável seja uniforme ao longo de um volume de controle genérico p e aproximando as integrais de superfície através da regra do ponto médio¹, pode-se determinar o valor deste gradiente por

$$(\nabla \varphi)_p \approx \frac{1}{\Delta V_p} \sum_{f \in p} \varphi_f \Delta \mathbf{S}_f \quad (2.7)$$

Uma vez que para este trabalho a variável escalar em questão é a

¹A integral de superfície é aproximada como sendo o produto entre o integrando avaliado no centroide f da face e o vetor área desta face [17].

pressão, a aproximação anterior torna-se

$$(\nabla P)_p \approx \frac{1}{\Delta V_p} \sum_{f \in p} P_f \Delta \mathbf{S}_f \quad (2.8)$$

sendo o somatório realizado considerando-se todas as faces do volume de controle p e o vetor área da face, bem como a pressão associados à face f . A figura 2.4 apresenta um volume de controle arbitrário p onde é possível aplicar a equação anterior.

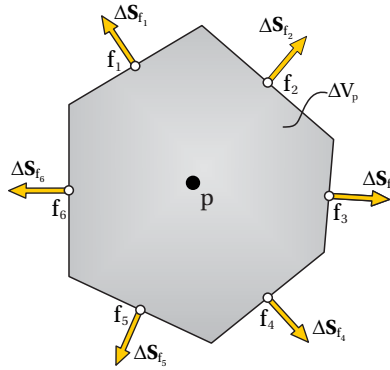


Figura 2.4 – Representação de um volume de controle poligonal enfatizando os centroides das faces e os vetores área destas.

A partir da equação (2.8), denominada na literatura por fórmula de Green-Gauss, é possível determinar aproximadamente o valor do gradiente de pressão em um volume de controle arbitrário. Para isso, é necessário conhecer o valor da variável nos centroides das faces. Como o método dos volumes finitos *cell-centered* é o aplicado neste trabalho, os valores discretos da variável estão associados aos centroides dos volumes de controle, que coincidem com as células da malha. Por tal motivo, deve ficar claro que algum esquema de interpolação é imprescindível para relacionar os valores nas faces com os valores nos centroides dos volumes.

Duas opções de interpolação para se determinar os valores de pressão nos centroides das faces são apresentadas na literatura. A primeira é a denominada abordagem *cell-based*, que considera somente os valores da variável nos centroides dos volumes de controle que compartilham uma face em comum. A segunda, mais elaborada, é a abordagem *vertex-based*

cujo princípio é a obtenção dos valores da variável nos vértices da malha para depois com eles determinar os valores nos centroides das faces. A nomenclatura em inglês é utilizada por questões de clareza, conseguindo-se expressar de maneira sucinta a ideia de cada abordagem. Nas próximas subseções tais abordagens são apresentadas com mais detalhes.

Deve ser ressaltado que os subíndices referentes às entidades geométricas que aparecem junto às variáveis, nas equações anteriores e que venham a surgir, indicam o local onde estas são avaliadas.

2.2.1 Abordagem *cell-based*

Esta abordagem se utiliza dos valores de pressão localizados nos volumes de controle adjacentes a uma dada face para determinar o valor da variável no centroide desta. Sendo assim, para uma face interna² conforme mostra a figura 2.5, o valor de pressão em f é determinado considerando os valores de pressão nos volumes de controle adjacentes p e n .

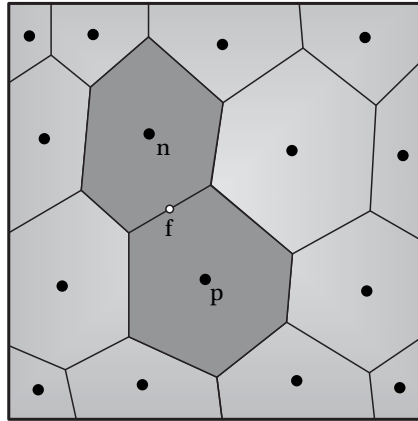


Figura 2.5 – Volumes de controle p e n e centroide da face f .

De uma maneira geral, a determinação do valor de pressão em f utilizando a abordagem *cell-based* pode ser escrita por

$$P_f = (1 - \beta_f) P_p + \beta_f P_n \quad (2.9)$$

² Face que não está localizada na fronteira do domínio.

onde P_f , P_p e P_n são os valores de pressão no centroide da face e nos volumes de controle p e n, respectivamente. O termo β_f é o fator de ponderação, cuja determinação foi considerada de duas maneiras distintas. As duas variantes, correspondentes a cada maneira de se obter tal fator, são apresentadas com mais detalhes a seguir.

2.2.1.1 Média aritmética

Nesta variante, utilizada em [3, 23, 30], calcula-se o valor de pressão em f considerando-se uma média aritmética dos valores de pressão associados aos volumes de controle adjacentes à referida face. Assim, β_f possui um valor fixo igual a 1/2 independentemente da geometria das entidades envolvidas [27] e a pressão no centroide f da face passa a ser expressa por

$$P_f = \frac{P_p + P_n}{2} \quad (2.10)$$

Com esta variante se faz uma aproximação grosseira a fim de determinar o valor de pressão na face. Esta aproximação seria razoável se os volumes de controle poligonais apresentassem características geométricas tais que o centroide f da face em questão estivesse disposto exatamente no (ou muito próximo do) ponto médio da linha que une os centroides dos referidos volumes de controle.

2.2.1.2 Média ponderada pela distância

Como normalmente o centroide da face não se encontra disposto sobre a linha que une os centroides dos volumes de controle vizinhos, muito menos no ponto médio desta, uma outra forma de se determinar a pressão em f é aqui apresentada. O intuito é obter um valor de pressão na face mais preciso, levando em conta características geométricas associadas às entidades envolvidas.

Esta nova variante tem como princípio projetar o centroide f da face sobre a linha que une os centroides dos dois volumes de controle em questão. Da figura 2.6 tem-se os elementos geométricos envolvidos: o vetor $\mathbf{L}_{p,f}$ que une o centroide de p e f, o vetor $\mathbf{r}_{p,n}$ que une os centroides dos dois volumes de controle, e o vetor \mathbf{s} que une o centroide p com o ponto f', que é a projeção do centroide f sobre a linha que une os centroides dos volumes. Essa projeção é feita a fim de obter um ponto sobre a linha que une p e n

localizado o mais próximo possível de f . Vale a pena ressaltar que apesar de f' estar localizado sobre a face na referida figura, esta configuração é uma situação particular.

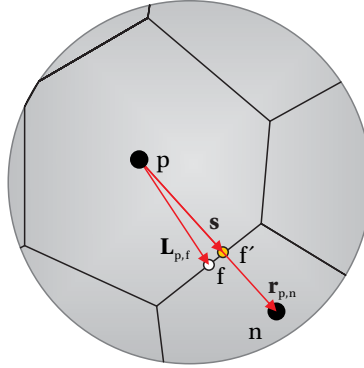


Figura 2.6 – Ilustração dos elementos geométricos utilizados na variante da média ponderada pela distância.

O fator de ponderação considerando a média ponderada pela distância é definido para uma situação geral por

$$\beta_f = \frac{|\mathbf{s}|}{|\mathbf{r}_{p,n}|} \quad (2.11)$$

Considerando o ângulo θ conforme apresentado na figura 2.7, tem-se, de acordo com a definição do produto escalar e utilizando as relações trigonométricas, que

$$\mathbf{r}_{p,n} \cdot \mathbf{L}_{p,f} = |\mathbf{r}_{p,n}| |\mathbf{L}_{p,f}| \cos \theta \quad (2.12)$$

$$\cos \theta = \frac{|\mathbf{s}|}{|\mathbf{L}_{p,f}|} \quad (2.13)$$

Agrupando as duas equações anteriores determina-se o módulo do vetor \mathbf{s} através de

$$|\mathbf{s}| = \frac{\mathbf{r}_{p,n} \cdot \mathbf{L}_{p,f}}{|\mathbf{r}_{p,n}|} \quad (2.14)$$

Finalmente, substituindo a última equação na equação (2.11) encontra-se a expressão final para o fator de ponderação

$$\beta_f = \frac{\mathbf{r}_{p,n} \cdot \mathbf{L}_{p,f}}{|\mathbf{r}_{p,n}|^2} \quad (2.15)$$

Quanto mais distante o centroide de n estiver de f , maior será o vetor $\mathbf{r}_{p,n}$ e menor será o fator de ponderação. Sendo assim, menor também será a influência do valor de pressão no volume n com relação ao valor de pressão no centroide f da face.

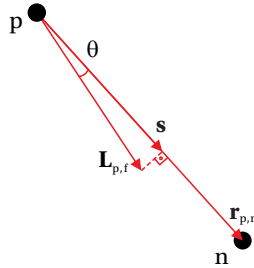


Figura 2.7 – Representação do ângulo θ .

Na situação particular em que os vetores $\mathbf{r}_{p,n}$ e $\mathbf{L}_{p,f}$ são colineares, o fator peso, conforme apresentado na equação (2.16), torna a equação (2.9) uma aproximação de segunda ordem já que uma interpolação linear estaria sendo considerada [27].

$$\beta_f = \frac{|\mathbf{L}_{p,f}|}{|\mathbf{r}_{p,n}|} \quad (2.16)$$

Através das variantes média aritmética e média ponderada pela distância é possível determinar os valores de pressão em todas as faces internas dos volumes de controle de uma malha. Uma atenção especial para o tratamento das faces de fronteira é dada a seguir.

Estando disponíveis os valores de pressão nos centroides de todas as faces de uma malha arbitrária, a aproximação do gradiente segundo a equação (2.8) é então realizada considerando-se dois procedimentos: com um passo e com dois passos.

2.2.1.3 Procedimento com um passo

O primeiro procedimento é o mais simples. Os valores de pressão nos centroides das faces são substituídos diretamente na equação (2.8) obtendo-se o valor do gradiente para cada volume de controle da malha.

2.2.1.4 Procedimento com dois passos

O segundo procedimento, apresentado em [30], é uma extensão do anterior visando melhorar a precisão dos gradientes de pressão através de uma correção dos valores nas faces internas.

Com os valores aproximados do gradiente de pressão obtidos utilizando-se a equação (2.8), um novo valor de pressão no centroide f da face pode ser determinado considerando-se uma expansão em série de Taylor truncada, ao redor do centroide do volume de controle p

$$P_{f,p} = P_p + (\nabla P)_p \cdot \mathbf{L}_{p,f} \quad (2.17)$$

Um segundo valor de pressão pode também ser obtido considerando o volume adjacente n

$$P_{f,n} = P_n + (\nabla P)_n \cdot \mathbf{L}_{n,f} \quad (2.18)$$

sendo o vetor $\mathbf{L}_{n,f}$ aquele que une o centroide do volume de controle n ao centroide da face em questão.

Tendo-se dois valores possíveis de pressão para cada face interna, uma média aritmética é realizada a fim de se obter o valor corrigido de pressão nesse local

$$P_f = \frac{P_{f,p} + P_{f,n}}{2} \quad (2.19)$$

Calculados assim os valores corrigidos de pressão em todas as faces internas dos volumes de controle, aplica-se novamente a equação (2.8) para assim obter novos valores do gradiente de pressão. Vale destacar que os valores de pressão nos centroides das faces de fronteira não são corrigidos.

Deve ficar claro que o valor aproximado do gradiente de pressão empregando a abordagem *cell-based* pode ser obtido considerando-se uma combinação entre as duas variantes (média aritmética e média ponde-

rada pela distância) com os dois procedimentos (um passo e dois passos). Sendo assim, é possível reconstruir os gradientes de quatro maneiras distintas.

2.2.1.5 Faces de fronteira

Com as variantes média aritmética e média ponderada pela distância é possível determinar os valores de pressão nos centroides das faces internas da malha. Vale ser ressaltado que tais valores são obtidos considerando-se os valores associados aos centroides dos volumes de controle que possuem as referidas faces em comum.

Analisando a figura 2.8 percebe-se que as faces de fronteira não apresentam a configuração descrita no parágrafo anterior, ou seja, tais faces não são adjacentes a dois volumes de controle. Logo, uma outra maneira de se obter os valores de pressão nos centroides destas deve ser adotada.

Já que os métodos de reconstrução serão utilizados na discretização de equações diferenciais com condições de contorno definidas nas fronteiras, pensou-se em utilizar essas condições para especificar os valores de pressão nas faces de fronteira [27].

Nos problemas analisados neste trabalho serão consideradas condições de Dirichlet, ou seja, a variação da pressão nas fronteiras será conhecida. Logo, os valores de pressão nos centroides das faces de fronteira serão determinados a partir das condições prescritas nas fronteiras do domínio.

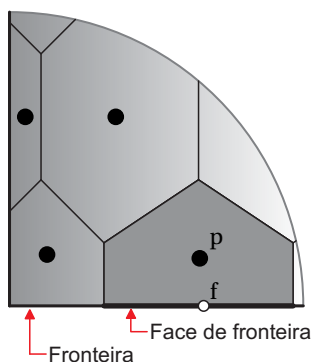


Figura 2.8 – Volume de controle e faces de fronteira.

2.2.2 Abordagem *vertex-based*

O princípio desta abordagem é determinar os valores de pressão nos centroides das faces utilizando os valores aproximados nos vértices destas.

Na abordagem *vertex-based*, os valores da variável nos vértices internos da malha ³ são aproximados por interpolação dos valores correspondentes aos volumes de controle que circundam a cada vértice. Isto é ilustrado esquematicamente na figura 2.9.

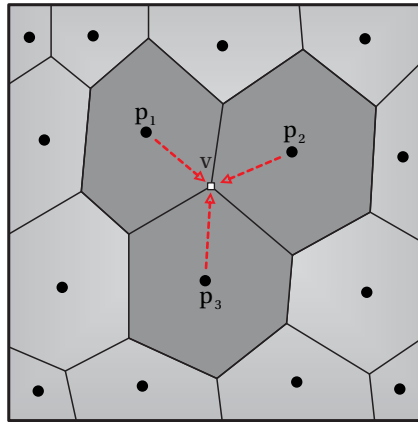


Figura 2.9 – Volumes de controle que cooperam para a determinação do valor da pressão no vértice.

A aproximação empregada em [23] para se determinar o valor de pressão em um dado vértice interno da malha é aqui utilizada

$$P_v = \frac{\sum_{k=1}^{N_v} w_k P_{p_k}}{\sum_{k=1}^{N_v} w_k} \quad (2.20)$$

onde $k = 1, 2, \dots, N_v$ com N_v sendo o número de volumes de controle que cercam o vértice. Nas malhas analisadas neste trabalho normalmente os

³ Vértices que não estão localizados na fronteira do domínio de solução.

vértices internos são cercados por três volumes de controle, mas esse número de volumes poderia ser maior. O entêncil⁴ para se aproximar o gradiente de pressão em um volume de controle p , segundo a abordagem *vertex-based*, é mostrado na figura 2.10.

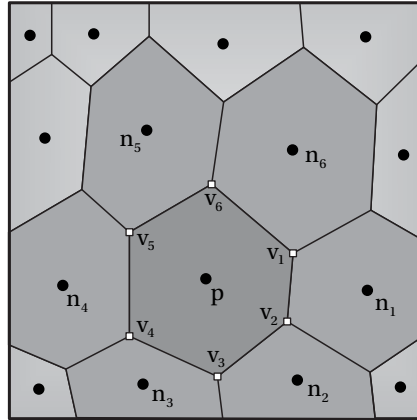


Figura 2.10 – Volumes de controle que contribuem para a determinação do gradiente de pressão associado ao volume de controle p .

A cada valor de pressão envolvido na equação (2.20) associa-se um fator de ponderação w_k . Na literatura encontram-se duas formas principais para determinar valores para os fatores de ponderação na abordagem *vertex-based*: o procedimento da ponderação pelo inverso da distância e o procedimento do pseudolaplaciano [19]. Segundo [19, 22] o procedimento do pseudolaplaciano garante precisão de segunda ordem na aproximação dos valores nos vértices, enquanto que com a ponderação pelo inverso da distância a precisão é menor que segunda ordem.

2.2.2.1 Ponderação pelo inverso da distância

Neste procedimento o fator de ponderação é considerado igual ao inverso da distância entre um vértice e o centroide do volume de controle

⁴ Conjunto de vizinhos ao volume de controle em questão que contribuem para o cálculo do gradiente de pressão.

circundante. Considerando a figura 2.11, o valor deste fator é dado por [23]

$$w_k = \frac{1}{|\mathbf{r}_{p_k, v}|} \quad (2.21)$$

Assim, com o intuito de se obter P_v , a contribuição do valor de pressão de um dado volume de controle é tanto maior quanto menor for a distância entre seu centroide e o vértice em questão.

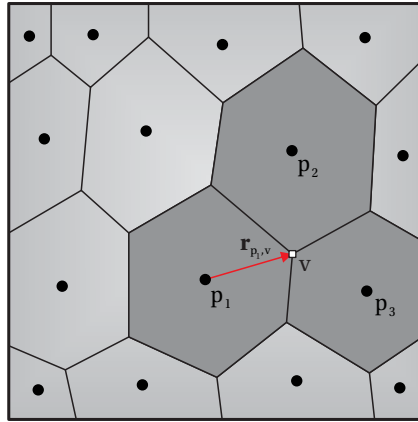


Figura 2.11 – Demonstração do vetor $\mathbf{r}_{p_1, v}$.

2.2.2.2 Procedimento do pseudolaplaciano

Este procedimento, proposto inicialmente em [16], apresenta uma forma mais elaborada de se obter os fatores de ponderação w_k . O intuito é determinar os valores para esses fatores que quando aplicados na equação (2.20) garantam precisão de segunda ordem na aproximação dos valores da variável nos vértices. Para tanto, deve ser satisfeita a denominada condição de pseudolaplaciano nulo, dada por

$$\sum_{k=1}^{N_v} w_k (\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v) = 0 \quad (2.22)$$

Esta condição é deduzida na seção A.1 do apêndice A. O vetor \mathbf{r}_{p_k} é o vetor posição do centroide de um volume de controle circundante ao vér-

tice em questão e \mathbf{r}_v o vetor posição desse vértice. O somatório é realizado considerando-se todos os volumes de controle que cercam o dado vértice.

As coordenadas cartesianas do vetor \mathbf{r}_v podem ser representadas por x_v e y_v e aquelas referentes ao vetor posição \mathbf{r}_{p_k} por x_{p_k} e y_{p_k} . Com isso, através da equação (2.22) obtém-se duas condições de pseudolaplaciano nulo na forma escalar

$$\sum_{k=1}^{N_v} w_k (x_{p_k} - x_v) = 0 \quad (2.23)$$

$$\sum_{k=1}^{N_v} w_k (y_{p_k} - y_v) = 0 \quad (2.24)$$

De acordo com procedimento apresentado, o fator de ponderação pode ser definido considerando-se um desvio Δw_k em relação à unidade

$$w_k = 1 + \Delta w_k \quad (2.25)$$

Observando as equações (2.23) e (2.24) e sabendo que os vértices das malhas analisadas neste trabalho possuem normalmente três volumes de controle os cercando, ter-se-á um sistema linear de duas equações, as duas condições de pseudolaplaciano nulo na forma escalar, com três incógnitas, os fatores de ponderação.

A fim de tornar possível a obtenção de valores dos fatores de ponderação satisfazendo a condição de pseudolaplaciano nulo, o seguinte problema de minimização auxiliar é proposto

$$\min \sum_{k=1}^{N_v} (\Delta w_k)^2 \quad (2.26)$$

sujeito às restrições dadas pelas equações (2.23) e (2.24). Como mostrado na seção A.2 do apêndice A, a solução deste problema fornece a seguinte expressão para o cálculo dos fatores de ponderação

$$w_k = 1 + \frac{I_{xy}R_y - I_{yy}R_x}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}(\Delta x_{p_k}) + \frac{I_{xy}R_x - I_{xx}R_y}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}(\Delta y_{p_k}) \quad (2.27)$$

onde

$$\Delta x_{p_k} = x_{p_k} - x_v$$

$$\Delta y_{p_k} = y_{p_k} - y_v$$

$$I_{xx} = \sum_{k=1}^{N_v} \Delta x_{p_k}^2$$

$$I_{yy} = \sum_{k=1}^{N_v} \Delta y_{p_k}^2$$

(2.28)

$$I_{xy} = \sum_{k=1}^{N_v} \Delta x_{p_k} \Delta y_{p_k}$$

$$R_x = \sum_{k=1}^{N_v} \Delta x_{p_k}$$

$$R_y = \sum_{k=1}^{N_v} \Delta y_{p_k}$$

Percebe-se que os valores dos fatores de ponderação dependem somente de parâmetros geométricos da malha, sendo necessário apenas dispor das coordenadas cartesianas dos vértices e dos centroides dos volumes de controle circundantes.

Um fato interessante pode ser ressaltado ao se isolar as coordenadas cartesianas do vetor \mathbf{r}_v das equações (2.23) e (2.24)

$$x_v = \frac{\sum_{k=1}^{N_v} w_k x_{p_k}}{\sum_{k=1}^{N_v} w_k} \quad (2.29)$$

$$y_v = \frac{\sum_{k=1}^{N_v} w_k y_{p_k}}{\sum_{k=1}^{N_v} w_k} \quad (2.30)$$

Verifica-se uma grande similaridade entre as equações anteriores e

(2.20). Os valores das coordenadas dos vértices da malha dependem dos valores das coordenadas dos volumes de controle circundantes assim como o valor da pressão nos vértices dependem dos valores de pressão nos volumes de controle ao seu redor.

Observação

De acordo com a disposição dos vértices em relação aos centroides dos volumes de controle circundantes notou-se através de testes realizados que os fatores de ponderação poderiam se tornar negativos. Este fato ocorre quando uma situação conforme apresentada na figura 2.12 é evidenciada.

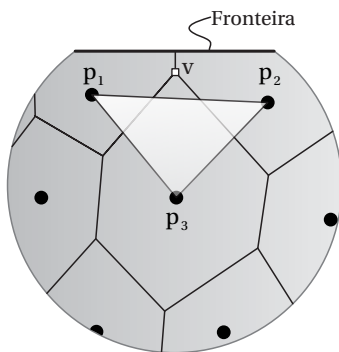


Figura 2.12 – Vértice deslocado do triângulo que se forma conectando os centroides dos volumes p_1, p_2 e p_3 .

Apesar desta anomalia, constatou-se nos testes que a determinação da pressão nos vértices utilizando o procedimento de pseudolaplaciano não foi afetada. O número de casos com esta particularidade é muito pequeno, visto que os vértices com essa configuração são apenas alguns daqueles localizados em volumes de controle adjacentes às fronteiras do domínio.

Problemas com os fatores de ponderação apresentando valores negativos e com alta magnitude são relatados em [16] para malhas triangulares extremamente distorcidas. A fim de superar tal problema, na publicação citada sugere-se limitar os valores dos fatores de ponderação à faixa entre 0 e 2. Sendo assim, a fatores com valor calculado maior a 2 deveria-se atribuir o valor 2 e a fatores com valor negativo deveria-se atribuir o valor

0. Porém, a referência [19] afirma que esse procedimento de ajuste faz com que a precisão do procedimento deixe de ser de segunda ordem. Por este motivo, neste trabalho nenhuma restrição com relação a tais valores foi considerada, sendo constatado que valores de pressão nos vértices apresentando tal particularidade não foram influenciados por tal atitude.

2.2.2.3 Vértices de fronteira

A determinação dos valores de pressão nos vértices, através da equação (2.20) em conjunto com algum dos dois procedimentos apresentados, é válida somente para os vértices internos da malha, conforme destacado anteriormente. Um procedimento diferenciado deve ser considerado para os vértices localizados sobre as fronteiras do domínio. Da mesma forma que na abordagem *cell-based*, optou-se por associar os valores nesses vértices com as condições de contorno estipuladas para o problema físico sendo resolvido.

Considerando a figura 2.13, a pressão no vértice de fronteira v será dada por

$$P_v = w_1 P_{f_1} + (1 - w_1) P_{f_2} \quad (2.31)$$

sendo P_{f_1} e P_{f_2} os valores de pressão nas faces adjacentes ao vértice, provenientes da condição de contorno do problema. Além disso, o respectivo fator de ponderação é dado por

$$w_1 = \frac{|\mathbf{r}_{v,f_2}|}{|\mathbf{r}_{f_1,f_2}|} \quad (2.32)$$

2.2.2.4 Obtenção dos valores de pressão nas faces

De posse dos valores de pressão nos vértices internos e de fronteira da malha e sabendo que no caso bidimensional cada face é composta por duas destas entidades (v_1 e v_2), os valores nos centroides das faces internas são determinados através de uma média aritmética simples. Esse procedimento se justifica plenamente em duas dimensões, pois esses centroides encontram-se exatamente no ponto médio entre os vértices envolvidos

$$P_f = \frac{P_{v_1} + P_{v_2}}{2} \quad (2.33)$$

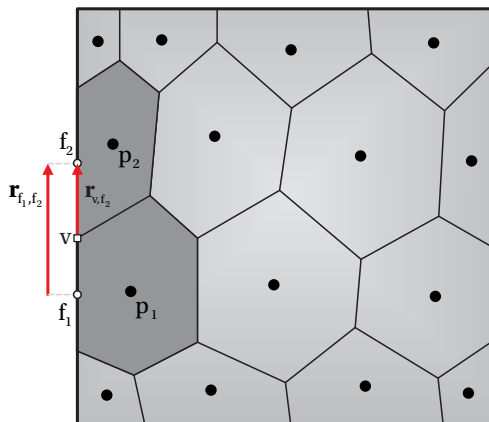


Figura 2.13 – Entidades envolvidas na determinação do valor de pressão em um vértice de fronteira.

Vale destacar que os valores de pressão nas faces de fronteira não são determinados com a equação anterior pois, nesse caso, se utilizam dos valores de pressão prescritos como condição de contorno.

Com todos os valores de pressão nos centroides das faces em mãos, parte-se para a aplicação da equação (2.8) para se obter finalmente os valores aproximados do gradiente de pressão em cada volume de controle da malha.

2.2.3 Comparação entre as abordagens *cell-based* e *vertex-based*

O número de variáveis envolvidas no cálculo da pressão no centroide de cada face interna da malha é maior na abordagem *vertex-based* com relação à abordagem *cell-based*. Através da figura 2.14 procura-se mostrar o exposto analisando-se apenas um centroide f . À esquerda, o valor de pressão na referida posição é obtido empregando-se *cell-based* e à direita *vertex-based*. Ao se utilizar a primeira abordagem apenas os valores de dois volumes de controle (p e n) contribuem para a determinação de P_f , já para a abordagem *vertex-based* são necessários quatro destas entidades (p_1, p_2, p_3 e p_4).

A abordagem *vertex-based* é mais elaborada que a *cell-based* pois nesta os valores conhecidos nos centroides dos volumes de controle são dire-

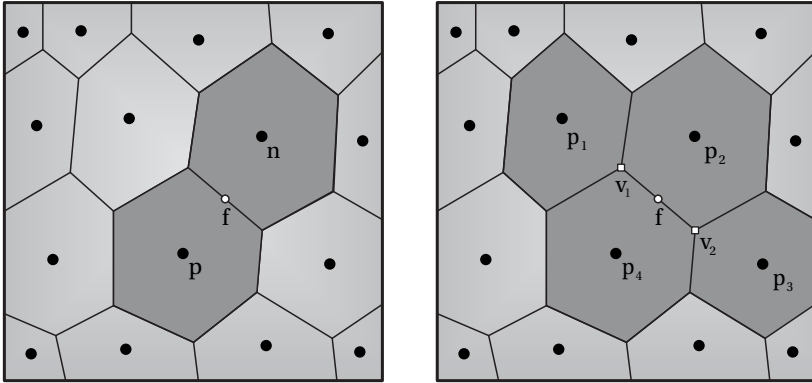


Figura 2.14 – Volumes de controle envolvidos na aproximação da pressão na face f . À esquerda *cell-based* e à direita *vertex-based*.

tamente empregados para se determinar as pressões em f , já naquela os valores de pressão conhecidos são utilizados para se obter os valores nos vértices para somente assim se determinar os valores nos centroides das faces.

Conforme [3] a abordagem *vertex-based* é mais precisa que a abordagem *cell-based* para malhas não-estruturadas, porém, demanda um maior custo computacional, por envolver um nível de cálculo adicional. Já a abordagem *cell-based* possui como principal vantagem a facilidade de implementação.

Apresentadas as duas abordagens comentadas, encerram-se assim as metodologias baseadas na fórmula de Green-Gauss empregadas neste trabalho.

2.3 Mínimos quadrados

Com este método assume-se que a pressão apresenta variação linear na vizinhança de um volume de controle. Partindo da expansão em série de Taylor na região adjacente ao centroide de um volume de controle,

$$P = P_p + (\nabla P)_p \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) + O(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_p|^2) \quad (2.34)$$

pode-se desconsiderar os termos de ordem maior que um, restando a expressão linear antes mencionada. Considere-se agora que tal variação se

dá entre o volume de controle p e um vizinho n_k , como representado na figura 2.15. A pressão no centroide de tal volume vizinho pode ser escrita por

$$P_{n_k} \approx P_p + (\nabla P)_p \cdot \mathbf{r}_{p,n_k} \quad (2.35)$$

sendo \mathbf{r}_{p,n_k} o vetor que conecta o centroide do volume p com o volume vizinho n_k . A expressão é válida para $k = 1, 2, \dots, N_{vc}$, onde N_{vc} é o número de volumes vizinhos do volume p . O erro desta aproximação é de segunda ordem, já que os termos dessa ordem e ordens mais altas foram desconsiderados.

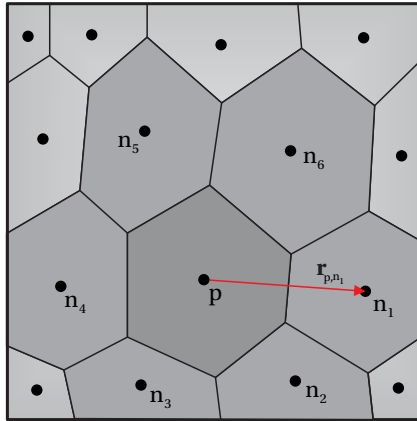


Figura 2.15 – Volume de controle p e seus vizinhos.

A equação (2.35) pode ser escrita em uma forma alternativa, considerando a comutatividade do produto escalar,

$$\mathbf{r}_{p,n_k} \cdot (\nabla P)_p = (\Delta x_k \mathbf{i} + \Delta y_k \mathbf{j}) \cdot \left(\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_p \mathbf{i} + \left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_p \mathbf{j} \right) \approx P_{n_k} - P_p \quad (2.36)$$

sendo Δx_k e Δy_k as componentes cartesianas do vetor \mathbf{r}_{p,n_k} .

Particularizando a equação (2.36) para todos os volumes vizinhos a p , obtém-se um sistema linear de equações, que pode ser escrito na forma matricial [20]

$$\begin{pmatrix} \Delta x_1 & \Delta y_1 \\ \Delta x_2 & \Delta y_2 \\ \vdots & \vdots \\ \Delta x_m & \Delta y_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_p \\ \left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{n_1} - P_p \\ P_{n_2} - P_p \\ \vdots \\ P_{n_m} - P_p \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

na qual se considerou $m = N_{vc}$ para tornar a representação matricial mais clara. Portanto, obteve-se um sistema linear de m equações com apenas duas incógnitas, que são as componentes cartesianas do gradiente de pressão. Analisando o sistema linear anterior, percebe-se que os coeficientes da primeira matriz dependem apenas de parâmetros geométricos conhecidos, enquanto que os termos independentes são diferenças de valores de pressão entre volumes vizinhos, os quais também consideram-se conhecidos em um método de reconstrução do gradiente.

Com o intuito de nas equações anteriores dar maior importância aos volumes de controle cujos centroides estejam mais próximos de p , uma ponderação pela distância é algumas vezes considerada. Uma matriz $\mathbb{W}_{m \times m}$, diagonal cujos componentes são fatores de ponderação λ_k , foi introduzida no sistema linear anterior da mesma forma encontrada em [20]. Obtém-se assim o sistema linear modificado

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 \Delta x_1 & \lambda_1 \Delta y_1 \\ \lambda_2 \Delta x_2 & \lambda_2 \Delta y_2 \\ \vdots & \vdots \\ \lambda_m \Delta x_m & \lambda_m \Delta y_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_p \\ \left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 (P_{n_1} - P_p) \\ \lambda_2 (P_{n_2} - P_p) \\ \vdots \\ \lambda_m (P_{n_m} - P_p) \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

Os fatores de ponderação são fatores geométricos que levam em consideração a distância entre os volumes de controle adjacentes da seguinte forma

$$\lambda_k = \frac{1}{|\mathbf{r}_{p,n_k}|^c} \quad (2.39)$$

Assim como em [19], o expoente c assume neste trabalho os valores 0, 1 e 2. É claro que ao considerar a primeira opção nenhuma ponderação é realizada, retornando-se para o caso original. O fato é que três possibilidades para o método surgem e são assim denominadas:

- Mínimos quadrados sem ponderação: $c = 0$;
- Mínimos quadrados com ponderação pelo inverso da distância: $c = 1$;
- Mínimos quadrados com ponderação pelo quadrado do inverso da distância: $c = 2$.

Para facilitar a análise posterior, o sistema linear apresentado na equação (2.38) pode ser representado de uma maneira simplificada por

$$\mathbb{A}_{m \times n} \mathbf{x}_{n \times 1} = \mathbf{b}_{m \times 1} \quad (2.40)$$

sendo n a dimensão física do problema considerado, m o número de vizinhos de p , \mathbb{A} a matriz dos coeficientes e \mathbf{b} o vetor independente. Como um caso bidimensional é analisado, n assume o valor 2, portanto, normalmente o sistema linear da equação (2.40) será sobredeterminado, já que ter-se-á $m > n$.

Sistemas sobredeterminados como os representados na equação (2.40) surgem na prática e de alguma forma precisam ser resolvidos. Uma maneira é utilizar o método dos mínimos quadrados, cujo princípio é determinar \mathbf{x} de modo que se minimize o erro nas equações do sistema. Este erro é definido como sendo a norma 2 do resíduo, conforme mostrado a seguir

$$\min \|\mathbb{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \quad (2.41)$$

O erro $\|\mathbb{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2$ pode ser interpretado como a distância entre \mathbf{b} e o ponto $\mathbb{A}\mathbf{x}$ localizado no espaço-coluna da matriz \mathbb{A} ⁵ [36]. Portanto, minimizando $\|\mathbb{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2$ está se determinando o ponto $\mathbb{A}\mathbf{x}$ mais próximo a \mathbf{b} que qualquer outro ponto no espaço-coluna. A solução do problema de mínimos quadrados para esse ponto será denominada $\bar{\mathbf{x}}$.

$$\bar{\mathbf{x}} = \operatorname{argmin} \|\mathbb{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \quad (2.42)$$

Na literatura existem inúmeros métodos para determinar uma solução para um problema de mínimos quadrados. Os dois métodos mais usuais são o método das equações normais e o da fatoração QR. Segundo [13] o primeiro é mais rápido porém menos preciso, sendo adequado para

⁵ O espaço-coluna da matriz \mathbb{A} é um subespaço vetorial que tem como base as colunas de \mathbb{A} .

problemas com baixo número de condição ⁶ e o segundo pode ser empregado em problemas mal condicionados, porém, seu custo computacional é aproximadamente duas vezes maior que o primeiro. As duas opções são discutidas com mais detalhes a seguir.

2.3.1 Equações normais

A figura 2.16 é mostrada para auxiliar a descrição do método. Ela ilustra um caso onde \mathbf{b} não pertence ao espaço-coluna de \mathbb{A} podendo-se então aplicar o método dos mínimos quadrados para obter a solução requerida. O sistema $\mathbb{A}_{3 \times 2} \mathbf{x}_{2 \times 1} = \mathbf{b}_{3 \times 1}$ representado tem os seguintes componentes

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

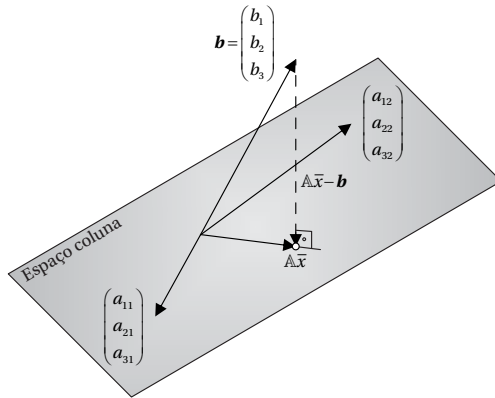


Figura 2.16 – Ilustração de um sistema linear onde \mathbf{b} não pertence ao espaço coluna de \mathbb{A} . Reproduzida de [36].

Na referida figura o vetor representado com uma linha tracejada é o resíduo correspondente, o qual é perpendicular ao espaço-coluna. Esta

⁶O número de condicionamento de uma matriz indica o quão sensível ela é a alterações nos valores de seus elementos, causadas por exemplo por erros de arredondamento. Tal número é definido por $c(\mathbb{A}) = \|\mathbb{A}\|_2 \|\mathbb{A}^{-1}\|_2$.

condição de ortogonalidade é necessária para minimizar a norma 2 desse resíduo, tornando assim a solução encontrada a melhor possível.

Como o vetor resíduo é perpendicular ao espaço-coluna, ele será por consequência perpendicular a todos os vetores coluna da matriz \mathbb{A} . Sendo cada um destes vetores representados por \mathbf{a}_n , com n variando de 1 ao número de colunas da matriz, para que a condição de ortogonalidade seja satisfeita é necessário que

$$\mathbf{a}_n^T \cdot (\mathbb{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = 0 \quad (2.44)$$

Reunindo as expressões correspondentes a todas as colunas da matriz \mathbb{A} , obtém-se a seguinte expressão

$$\mathbb{A}^T(\mathbb{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = 0 \quad (2.45)$$

com \mathbb{A}^T sendo a transposta da matriz dos coeficientes. Manipulando-se algebricamente a equação anterior, chega-se a

$$\mathbb{A}^T \mathbb{A} \bar{\mathbf{x}} = \mathbb{A}^T \mathbf{b} \quad (2.46)$$

onde a matriz $\mathbb{A}^T \mathbb{A}$ é uma matriz quadrada (ordem 2 para o caso bidimensional considerado), simétrica e inversível [36]. O conjunto de equações representado pelo sistema da equação (2.46) é conhecido na literatura como as "equações normais" [36] e também pode ser escrito para o caso considerado neste trabalho na forma expandida

$$\begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m \lambda_k^2 \Delta x_k^2 & \sum_{k=1}^m \lambda_k^2 \Delta x_k \Delta y_k \\ \sum_{k=1}^m \lambda_k^2 \Delta x_k \Delta y_k & \sum_{k=1}^m \lambda_k^2 \Delta y_k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_p \\ \left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m \lambda_k^2 \Delta x_k (P_{n_k} - P_p) \\ \sum_{k=1}^m \lambda_k^2 \Delta y_k (P_{n_k} - P_p) \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

A solução do problema de mínimos quadrados torna-se simples, já que $\mathbb{A}^T \mathbb{A}$ é uma matriz inversível. Como o intuito é determinar o gradiente

de pressão encontrado no vetor $\bar{\mathbf{x}}$, basta inverter tal matriz obtendo-se

$$\bar{\mathbf{x}} = (\mathbb{A}^T \mathbb{A})^{-1} \mathbb{A}^T \mathbf{b} \quad (2.48)$$

onde $(\mathbb{A}^T \mathbb{A})^{-1}$ é a matriz inversa de $(\mathbb{A}^T \mathbb{A})$. Vale a pena destacar que a solução deve ser obtida para cada volume de controle da malha.

2.3.2 Fatoração QR

A fatoração QR da matriz $\mathbb{A}_{m \times n}$ é dada pelo produto de uma matriz $\mathbb{Q}_{m \times m}$ ortogonal ⁷ e uma matriz triangular superior $\mathbb{R}_{m \times n}$. Ou seja,

$$\mathbb{A} = \mathbb{Q} \mathbb{R} \quad (2.49)$$

A matriz ortogonal \mathbb{Q} pode ser obtida através de um método de ortogonalização, cujo princípio é transformar os vetores coluna da matriz \mathbb{A} em vetores coluna ortonormais. Dois métodos de ortogonalização conhecidos são o de Gram-Schmidt e o de Householder, encontrados em [13, 15, 36].

O primeiro é aplicável a situações onde a matriz \mathbb{A} é composta por vetores coluna linearmente independentes ⁸. A ideia do método é eliminar, através de projeções, as componentes de cada vetor coluna nas direções já fixadas por outros vetores coluna.

O método de Householder é mais robusto numericamente, podendo ser aplicado em casos em que os vetores colunas sejam quase linearmente dependentes. O princípio do método é refletir os vetores coluna da matriz \mathbb{A} de tal modo que estes possam ser escritos considerando apenas uma de suas direções.

A matriz triangular superior \mathbb{R} apresenta elementos nulos que podem ser desconsiderados. Nesse caso, a fatoração QR pode ser escrita na forma reduzida

$$\mathbb{A} = \mathbb{Q} \mathbb{R} = \begin{pmatrix} \mathbb{Q}_1 & \mathbb{Q}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{R}_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

⁷Matriz ortogonal é aquela formada por vetores coluna ortonormais (ortogonais entre si e com módulo unitário). Devido a isso, para tal matriz a sua inversa é igual a sua transposta, $\mathbb{Q}^{-1} = \mathbb{Q}^T$. Assim, $\mathbb{Q}^T \mathbb{Q} = \mathbb{I}$.

⁸ Um conjunto de vetores coluna é dito linearmente independente quando a sua combinação linear fornece para os coeficientes somente a solução trivial. Exemplo: a combinação $c_1 \mathbf{a} + c_2 \mathbf{b} + c_3 \mathbf{c} = 0$ fornecendo $c_1 = c_2 = c_3 = 0$.

Percebe-se que a matriz original \mathbb{Q} é decomposta em duas outras, \mathbb{Q}_1 e \mathbb{Q}_2 . Limitando o número de colunas de \mathbb{Q} de acordo com o número de colunas de \mathbb{A} , obtém-se a matriz \mathbb{Q}_1 , cuja dimensão é $m \times n$.

O mesmo ocorre com a matriz \mathbb{R} . Limitando o seu número de linhas de acordo com o número de colunas da matriz \mathbb{A} , obtém-se \mathbb{R}_1 cuja dimensão é $n \times n$. Ao efetuar tal procedimento, consegue-se trabalhar somente com a porção de \mathbb{R} que apresenta elementos não-nulos.

Realizando o produto das matrizes na equação (2.50), por blocos, substituindo depois tal resultado na equação (2.40) e sabendo que a matriz \mathbb{Q}_1 é uma matriz ortogonal, obtém-se a seguinte expressão

$$\mathbb{R}_1 \bar{\mathbf{x}} = \mathbb{Q}_1^T \mathbf{b} \quad (2.51)$$

Invertendo-se a matriz triangular superior \mathbb{R}_1 obtém-se a solução requerida

$$\bar{\mathbf{x}} = \mathbb{R}_1^{-1} \mathbb{Q}_1^T \mathbf{b} \quad (2.52)$$

A fatoração QR é o método utilizado neste trabalho já que ele é mais robusto por ser o número de condicionamento da mesma ordem de grandeza daquele da matriz original. Já quando as equações normais são aplicadas, o número de condicionamento da matriz $(\mathbb{A}^T \mathbb{A})$ é o quadrado do da matriz \mathbb{A} [36], tornando o método muito mais sensível a erros aritméticos no cálculo dos coeficientes da matriz.

A biblioteca de álgebra linear chamada de JAMA [35], desenvolvida na linguagem C++ foi utilizada neste trabalho para a obtenção das matrizes no método de fatoração QR. Optou-se pela utilização de tal biblioteca já que os algoritmos disponíveis são otimizados e amplamente validados. O método de ortogonalização utilizado em tal biblioteca é o de Householder.

2.3.3 Comentários

Uma observação importante na aplicação dos mínimos quadrados é que para realizar a reconstrução do gradiente não se necessita dos valores de pressão nas fronteiras do domínio conforme ocorre nos métodos que utilizam a fórmula de Green-Gauss. Analisando a equação (2.8) referente a tal fórmula, verifica-se que o gradiente é calculado através de um somatório considerando todas as faces do volume de controle p , não importando se essas são internas ou de fronteira. Por outro lado observando a equação

(2.37) referente aos mínimos quadrados, percebe-se que o gradiente é determinado considerando informações dos vizinhos do volume de controle analisado, logo, como um volume de controle localizado na fronteira não é totalmente cercado por vizinhos, as parcelas referentes aos valores de pressão na fronteira não são levadas em conta. Outro ponto relevante a respeito dos mínimos quadrados é que o método não depende da geometria dos volumes de controle da malha, e sim apenas das posições dos centroides destas entidades geométricas.

ANÁLISE COMPARATIVA DOS MÉTODOS DE RECONSTRUÇÃO

3.1 Introdução

De posse dos métodos de reconstrução explícita do gradiente apresentados no capítulo anterior, procura-se neste capítulo determinar quais destes métodos apresentam o melhor comportamento com relação à precisão na aproximação do gradiente bem como com relação ao tempo computacional associado.

A determinação dos métodos que melhor se enquadram segundo a precisão é realizada em malhas poligonais ditas regulares, formadas principalmente por hexágonos do mesmo tamanho e forma, e também em malhas poligonais com algum tipo de distorção geométrica. Já o tempo computacional é analisado somente nas malhas regulares.

A estratégia considerada nos testes apresentados neste capítulo é a de aplicar os diferentes métodos de reconstrução do gradiente a valores discretos de pressão obtidos a partir de expressões analíticas. Diferenciando essas expressões podem ser obtidos os valores exatos dos gradientes associados aos volumes de controle. De posse desses valores exatos, pode-se então mensurar o erro associado a cada método de reconstrução e analisar seu comportamento ao se refinar progressivamente as malhas. Dessa forma pode-se estimar a ordem de convergência associada a cada método, sendo que métodos mais precisos apresentarão ordens de convergência

maiores. Para tanto, são consideradas geometrias simples e malhas de estrutura topológica fixa com o intuito de manter sob controle a forma com que o refino destas é realizado.

Os principais objetivos deste capítulo são analisar a influência de diferentes funções, que fornecem os campos de pressão no domínio, e a influência da geometria de diferentes malhas poligonais no comportamento do erro do gradiente ao se empregar os métodos de reconstrução apresentados no capítulo 2. A análise do tempo de computação associado a esses métodos também é um dos objetivos.

Tanto a precisão dos resultados numéricos como o tempo computacional são analisados para se determinar qual método apresenta o melhor custo/benefício, isto é, resultados aceitáveis em tempos de execução razoáveis. Procura-se determinar se os métodos com melhor precisão consomem realmente um tempo muito maior com relação aos demais.

Os resultados descritos neste capítulo foram obtidos com códigos implementados na linguagem C^{++} .

3.1.1 Funções analisadas

Com o intuito de analisar a precisão da reconstrução do gradiente com os diferentes métodos descritos, os resultados serão comparados com valores do gradiente exatos, obtidos por diferenciação de algumas funções propostas. Os métodos de reconstrução fornecem o valor do gradiente aproximado associado a cada volume de controle da malha. A fim de poder realizar a comparação desse valor com o gradiente exato, considerar-se-á que o valor representativo para um volume de controle é aquele avaliado no seu centroide. Em todos os casos considerados, o domínio analisado é um quadrado. Segundo mostra a figura 3.1, a origem do sistema de coordenadas se encontra no canto inferior esquerdo da malha.

Conforme descrito no capítulo anterior, os dados de entrada para os métodos de reconstrução do gradiente são o conjunto de valores discretos de pressão associados a todos os volumes de controle da malha. Nos testes apresentados neste capítulo, esses valores discretos são obtidos mediante avaliação das funções analíticas propostas nos centroides dos volumes de controle.

Foram consideradas quatro tipos de funções, cada uma apresentando uma característica distintiva. A primeira é uma função linear, para a qual

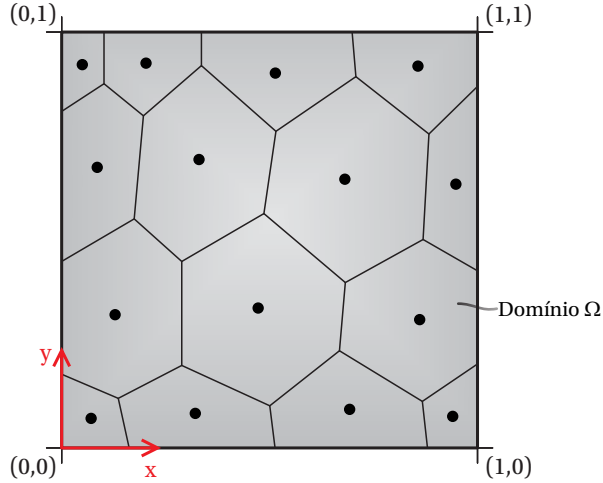


Figura 3.1 – Origem do sistema de coordenadas nas malhas analisadas.

os métodos que apresentarem precisão de segunda ordem deverão fornecer valores do gradiente exatos. Outras duas funções consideradas são não-lineares, sendo que uma delas apresenta oscilações no interior do domínio, enquanto que a outra é quase-monotônica. Finalmente, a última função apresenta uma descontinuidade da derivada ($\partial P / \partial x$) na linha média do domínio $x = 1/2$. As expressões matemáticas das funções utilizadas são apresentadas a seguir.

Função linear

$$P = 5x - 3y \quad (3.1)$$

Função oscilatória

$$P = 5x - 3y + B [\sin(7x + 1)\sin(4y + 1)] \quad (3.2)$$

Função exponencial

$$P = 5x - 3y + B [\exp(-2x + 3y)] \quad (3.3)$$

Função descontínua

$$P = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(x - \frac{1}{2} \right) [(1 + E)\text{sen} y + (1 - E)\cos y] + \text{sen} y, & x \leq \frac{1}{2} \\ \exp \left(x - \frac{1}{2} \right) \text{sen} y, & x > \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.4)$$

Os parâmetros B e E envolvidos na definição das funções valem respectivamente 2 e 50. Testes com valores diferentes foram realizados, contudo nenhuma alteração nos resultados foi percebida, concluindo-se que os parâmetros não influenciam os resultados para um dado tipo de função. Logicamente que alguns valores dos parâmetros alteram totalmente a função, quando $B = 0$ as funções oscilatória e exponencial tornam-se funções lineares e quando $E = 1$ a função descontínua se torna contínua.

As figuras 3.2, 3.3, 3.4, 3.5 mostram a variação da pressão no domínio considerando cada uma das funções apresentadas. Já as figuras 3.6, 3.7, 3.8 e 3.9 mostram o campo do gradiente de pressão no domínio.

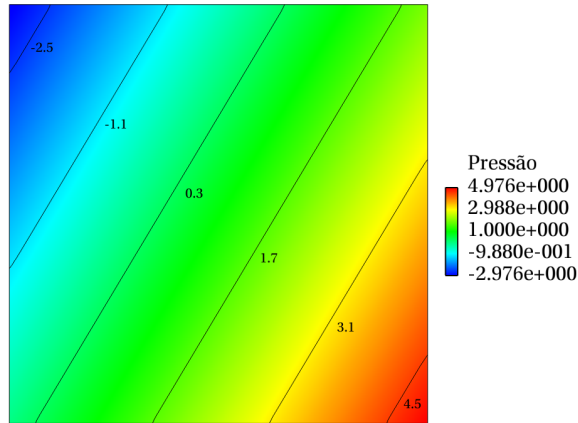


Figura 3.2 – Campo de pressão segundo a função linear.

As funções apresentadas foram utilizadas nas malhas regulares primeiramente para determinar quais métodos de reconstrução do gradiente apresentavam o melhor comportamento. Definidos esses métodos, somente a função oscilatória foi analisada nas demais malhas. Nos métodos que precisam de valores da pressão nas fronteiras foram considerados valores obtidos a partir das próprias funções propostas.

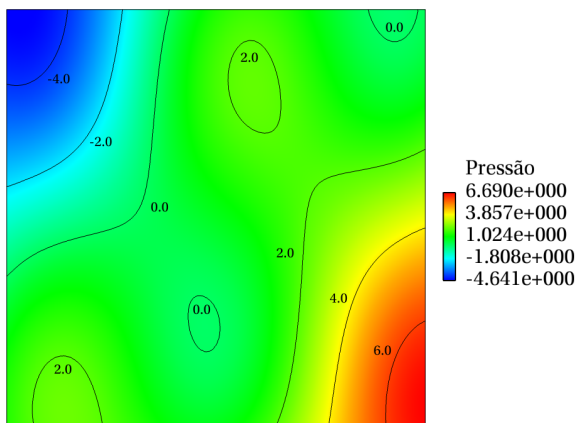


Figura 3.3 – Campo de pressão segundo a função oscilatória.

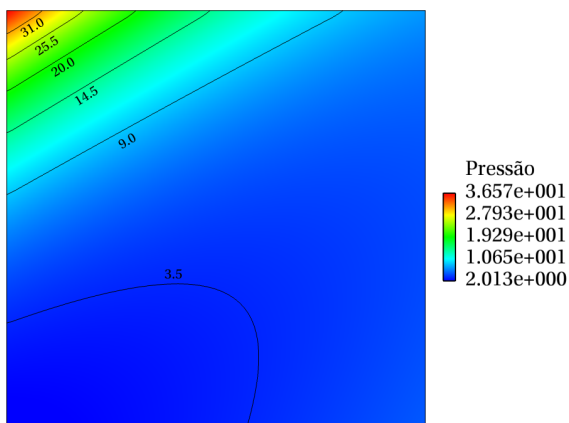


Figura 3.4 – Campo de pressão segundo a função exponencial.

3.1.2 Malhas consideradas

As malhas consideradas neste trabalho são denominadas de regulares, não-conformes, com razão de aspecto alta, com distorção aleatória e com distorção senoidal, cada uma apresentando uma determinada característica geométrica.

Naquelas denominadas de regulares, ver exemplo na figura 3.10 (a), considerou-se uma sequência em que a malha mais grosseira apresenta 85

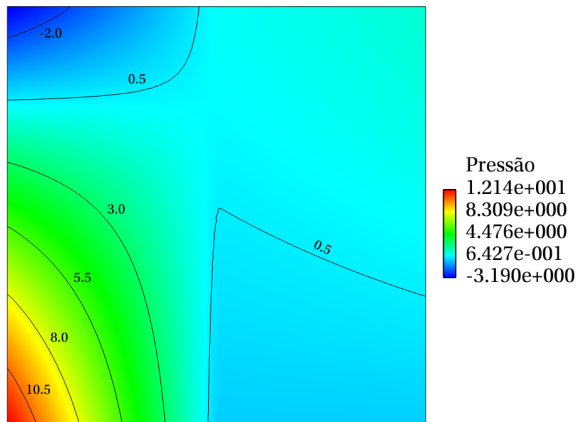


Figura 3.5 – Campo de pressão segundo a função descontínua.

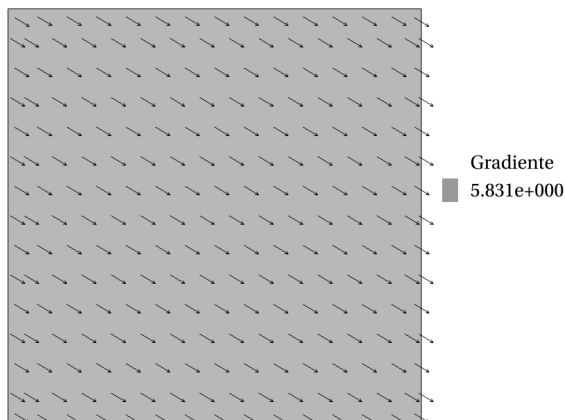


Figura 3.6 – Campo do gradiente de pressão referente à função linear.

volumes de controle e a mais refinada 6930. Essas malhas são constituídas predominantemente por volumes de controle hexagonais com as mesmas dimensões. Todas as funções expostas na seção 3.1.1 foram testadas considerando-se essa sequência.

As malhas não-conformes são aquelas cujos volumes de controle podem possuir vértices que se localizam sobre as faces de volumes de controle adjacentes. A sequência de malhas utilizada é tal que a mais grosseira apresenta 220 volumes de controle e a mais refinada 56320. Na figura 3.10

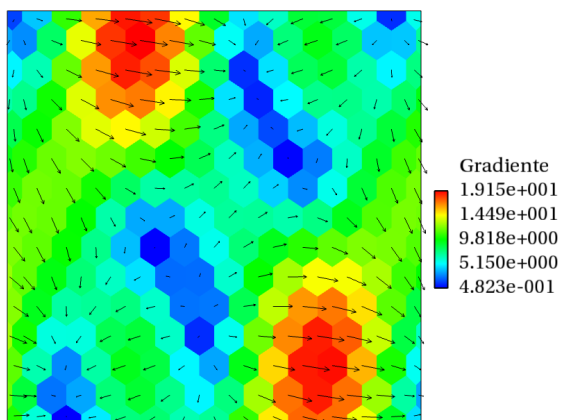


Figura 3.7 – Campo do gradiente de pressão referente à função oscilatória.

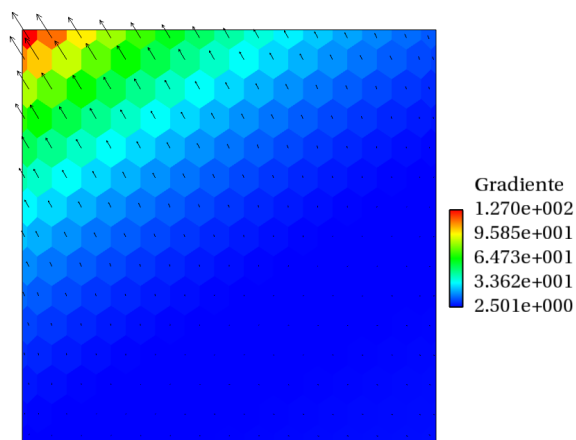


Figura 3.8 – Campo do gradiente de pressão da função exponencial.

(b) está ilustrado um exemplo de uma malha não-conforme utilizada neste trabalho. Nessa figura destacam-se duas regiões distintas: os volumes de controle de uma delas possuem a metade do tamanho dos volumes de controle da outra.

As malhas com razão de aspecto alta são malhas cujos volumes de controle possuem uma dimensão muito maior em uma determinada direção. Neste trabalho tais malhas possuem a dimensão na coordenada

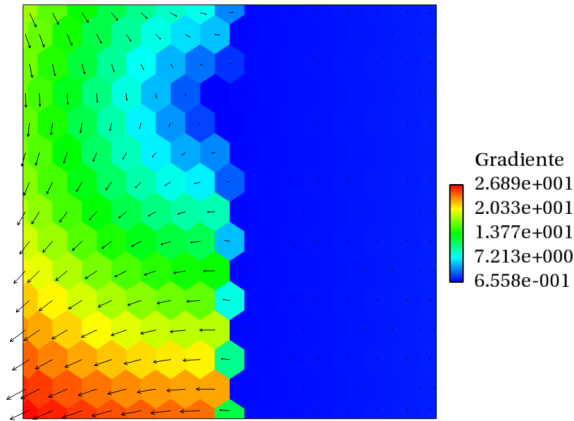


Figura 3.9 – Campo do gradiente de pressão da função descontínua.

vertical muito maior que a dimensão na horizontal, em uma proporção aproximadamente igual a 10. A sequência de malhas utilizada vai desde uma malha de 205 até uma de 9331 volumes. Na figura 3.10 (c) é mostrada a malha com 427 volumes de controle, onde se pode perceber claramente o alongamento desses volumes na direção vertical.

Nas malhas com distorção aleatória os vértices internos das malhas-base regulares são deslocados aleatoriamente [29]. Nessas malhas, o máximo deslocamento em cada direção coordenada é 12.5% do comprimento característico da malha. Esse comprimento será definido na equação (3.10). Na figura 3.10 (d) encontra-se um exemplo de uma malha com distorção aleatória apresentando 232 volumes de controle.

Para as malhas com distorção senoidal, a distorção dos volumes de controle ocorre através dos deslocamentos dos vértices segundo as relações matemáticas seguintes, encontradas em [18] e [29]

$$x'_v = x_v + \delta_v \quad (3.5)$$

$$y'_v = y_v + \delta_v \quad (3.6)$$

$$\delta_v = C \sin(2\pi x_v) \sin(2\pi y_v) \quad (3.7)$$

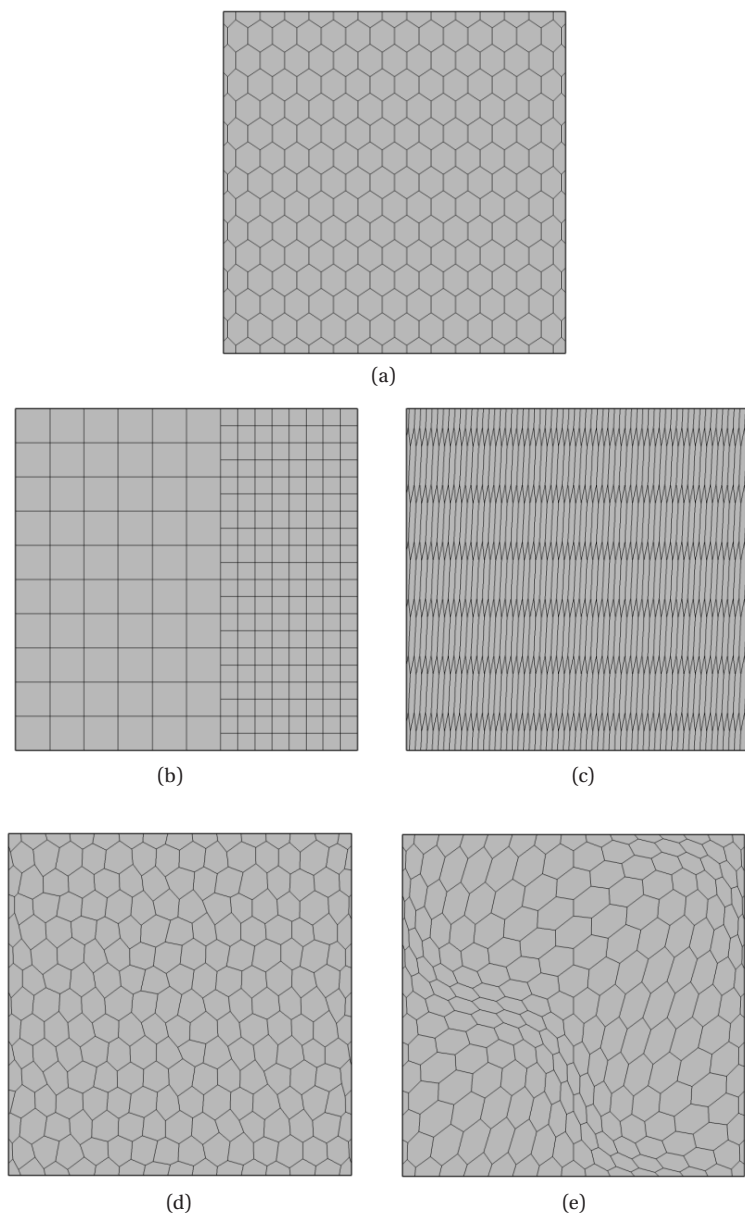


Figura 3.10 – Malhas: (a) regular, (b) não-conforme, (c) com razão de aspecto alta, (d) com distorção aleatória, (e) com distorção senoidal.

Nas relações matemáticas das equações (3.5), (3.6) e (3.7), as coordenadas dos vértices nas malhas-base regulares estão representadas por x_v e y_v e as novas posições dos vértices nas malhas distorcidas por x'_v e y'_v . A amplitude dos deslocamentos dos vértices (C) controla o nível de distorção das malhas, sendo o valor 0.08 adotado nos testes a serem apresentados.

Na figura 3.10 (e) encontra-se um exemplo de uma malha com distorção senoidal. Percebem-se regiões onde os volumes de controle estão mais deformados e que a deformação não é dada somente em uma direção.

Nas tabelas 3.1, 3.2 e 3.3 são mostradas informações sobre as entidades geométricas das malhas utilizadas. Todas as sequências de malhas são apresentadas sendo N_c o número de volumes de controle, N_{fi} o número de faces internas, N_{ff} o número de faces de fronteira e N_{ve} o número de vértices de cada uma das malhas. Já que as malhas com distorção aleatória e senoidal derivam das malhas-base regulares, na tabela 3.1 são mostradas as informações referentes a essas três malhas.

Tabela 3.1 – Informações sobre as malhas regulares, com distorção aleatória e com distorção senoidal.

Malha	N_c	N_{fi}	N_{ff}	N_{ve}
1	85	220	36	172
2	232	637	60	466
3	742	2119	108	1486
4	2232	6509	188	4466
5	4128	12128	257	8258
6	6930	20459	332	13862

Tabela 3.2 – Informações sobre as malhas não-conformes.

Malha	N_c	N_{fi}	N_{ff}	N_{ve}
1	220	416	58	255
2	880	1712	116	949
3	3520	6944	232	3657
4	14080	27968	464	14353
5	56320	112256	928	56865

Tabela 3.3 – Informações sobre as malhas com razão de aspecto alta.

Malha	N_c	N_{fi}	N_{ff}	N_{ve}
1	205	524	92	412
2	427	1146	136	856
3	729	2008	180	1460
4	1573	4452	268	3148
5	3820	11039	422	7642
6	9331	27330	664	18664

3.1.3 Norma do erro analisada

Tendo-se os valores exatos do gradiente, determinados mediante diferenciação das funções analíticas, e valores aproximados, determinados aplicando os diferentes métodos de reconstrução, pode-se determinar o erro associado à aproximação e analisar seu comportamento à medida que as malhas são refinadas. É esperado que o erro decresça com o refinamento das malhas, sendo a determinação da ordem de convergência um dos objetivos deste capítulo, a fim de se avaliar a qualidade dos diferentes métodos.

O erro na aproximação do gradiente de pressão em cada volume de controle da malha [24], é dado por

$$\varepsilon_i = \nabla P_i^{num} - \nabla P_i^a \quad (3.8)$$

onde ∇P_i^{num} é o gradiente numérico e ∇P_i^a é o valor do gradiente analítico. Conforme já comentado, o gradiente analítico é determinado considerando-se as coordenadas dos centroides dos volumes de controle da malha.

A fim de quantificar o erro em toda a malha, a forma adimensional da norma L_2 deste erro para o gradiente de pressão foi utilizada, seguindo-se a ideia encontrada em [18]

$$\varepsilon_{grad} = \left(\frac{\sum_{i=1}^{N_c} |\varepsilon_i|^2 \Delta V_i}{\sum_{i=1}^{N_c} |\nabla P_i^a|^2 \Delta V_i} \right)^{1/2} \quad (3.9)$$

sendo que os somatórios abrangem todos os volumes de controle da malha

e ΔV_i representa o volume de cada um deles. O numerador da referida expressão é a versão discreta da norma $\left[\int_{\Omega} |\nabla P^{num} - \nabla P^a|^2 dV \right]^{1/2}$, sendo Ω o domínio em análise. O denominador é a norma da solução analítica no domínio [29].

O domínio físico de análise é discretizado considerando uma sequência de malhas com um refinamento que procura manter a mesma estrutura destas. A intenção é verificar a redução do valor da norma do erro, definida na equação (3.9), ao se realizar esse refinamento além de tentar determinar a ordem de convergência da aproximação do gradiente.

As sequências de malhas utilizadas satisfazem a chamada propriedade do refinamento consistente [38], que requer que o comprimento característico dos volumes de controle destas malhas decresça uniformemente com o acréscimo do número de volumes de controle, N_c . Esta propriedade permite que se faça a avaliação da ordem de convergência da norma do erro, porém, deve-se ressaltar que a manutenção da estrutura topológica da malha considerada neste trabalho é importante, já que o refinamento deve apresentar regularidade.

O comprimento característico da malha mencionado anteriormente é determinado pela seguinte expressão

$$h = \frac{\sum_{i=1}^{N_c} (\Delta V_i)^{1/2}}{N_c} \quad (3.10)$$

com o somatório abrangendo todos os volumes de controle da malha. Admitindo que o comprimento característico de um dado volume de controle i é dado por $(\Delta V_i)^{1/2}$, a expressão anterior define h como a média aritmética dos comprimentos de todos os volumes da malha.

Se b é a ordem de convergência de um método numérico, é de se esperar que o erro associado possa ser representado pela expressão [24]

$$\varepsilon_{grad} = a h^b \quad (3.11)$$

sendo a uma constante que independe de h . Uma forma prática de determinar o valor da ordem de convergência de um dado método, utilizada também neste trabalho, é ajustar o conjunto de valores de erro obtidos em uma sequência de malhas a uma expressão da forma da equação (3.11). Para isso, foi utilizado o *software* Origin [32] com o qual foi possível gerar

os gráficos que apresentam os ajustes dos valores do erro à expressão comentada e também fazer a análise dos dados.

Nos gráficos apresentados a seguir, cada ponto representa o valor da norma do erro associado a uma dada malha e método de reconstrução do gradiente. Para cada sequência de malhas apresentam-se também os ajustes dos pontos a expressões na forma da equação (3.11). Como se pode observar nos gráficos com escalas logarítmicas, os ajustes são representados por linhas retas cuja inclinação está dada pelo valor da ordem de convergência b . Dessa forma, a ordem de convergência pode ser interpretada como a taxa de caimento da norma do erro à medida que a malha é refinada.

3.2 Convergência dos métodos

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos com os diferentes métodos de reconstrução, funções analíticas e tipos de malha. Tais resultados estão expostos na forma de gráficos e tabelas, sendo que as siglas surgentes têm seu significado nas tabelas 3.4 e 3.5. A primeira é referente aos métodos de reconstrução do gradiente e a segunda às malhas analisadas.

Nos gráficos de convergência, a norma do erro do gradiente está representada no eixo vertical e o comprimento característico das malhas no eixo horizontal. As linhas tracejadas são apenas linhas de referência que indicam quedas do erro de primeira ordem e segunda ordem, respectivamente.

Os gráficos de convergência são apresentados em três grupos: resultados com métodos utilizando a fórmula de Green-Gauss e abordagem *cell-based*, resultados utilizando Green-Gauss e abordagem *vertex-based* e resultados utilizando o método de mínimos quadrados. Assim, para cada tipo de malha e função analisada três gráficos são apresentados.

A convergência pode ser analisada somente a partir de um certo grau de refinamento da malha. Por exemplo, se a aproximação utilizada for de segunda ordem, porém, a malha for muito grosseira, componentes do erro de ordem mais alta podem não ser desprezíveis, prejudicando a estimativa da ordem real de convergência. Alguns pontos dos gráficos foram desconsiderados por esse motivo, isto é, os valores em algumas das malhas

Tabela 3.4 – Significado das siglas referentes aos métodos de reconstrução do gradiente.

Sigla	Método
GGCBA_1S	Green-Gauss <i>cell-based</i> com média aritmética e um passo
GGCBA_2S	Green-Gauss <i>cell-based</i> com média aritmética e dois passos
GGCBW_1S	Green-Gauss <i>cell-based</i> com média ponderada pela distância e um passo
GGCBW_2S	Green-Gauss <i>cell-based</i> com média ponderada pela distância e dois passos
GGVBID	Green-Gauss <i>vertex-based</i> com ponderação pelo inverso da distância
GGVBPL	Green-Gauss <i>vertex-based</i> utilizando pseudolaplaciano
LSID	Mínimos quadrados com ponderação pelo inverso da distância
LSSID	Mínimos quadrados com ponderação pelo quadrado do inverso da distância
LSUN	Mínimos quadrados sem ponderação

Tabela 3.5 – Significado das siglas referentes às malhas.

Sigla	Malhas
RE	regulares
NC	não-conformes
RA	com razão de aspecto alta
DA	com distorção aleatória
DS	com distorção senoidal

mais grosseiras alteravam a linha de tendência visível nas malhas mais refinadas.

A convergência dos métodos é analisada primeiramente com o objetivo de se captar os efeitos que as diversas funções provocam nos resultados utilizando-se as malhas regulares. Logo após, considerando a função oscilatória, as malhas serão variadas buscando-se isolar o efeito das

particularidades geométricas destas sobre os resultados.

3.2.1 Testes com diferentes funções

O objetivo desta subseção é determinar a influência das diferentes funções, apresentas na seção 3.1.1, nos resultados dos métodos de reconstrução do gradiente. Deve ficar claro que somente as malhas regulares são as utilizadas para esse fim.

Uma observação relevante com relação às malhas regulares é que elas apresentam volumes de controle com formato hexagonal e dimensões idênticas na região central e apenas alguns volumes de controle deformados nas regiões próximas às fronteiras. Aqueles localizados próximos às fronteiras serão aqui denominados de volumes laterais. Os demais serão denominados de volumes centrais. Na figura 3.11 está representada uma malha regular onde os volumes de controle com coloração mais escura são os volumes laterais.

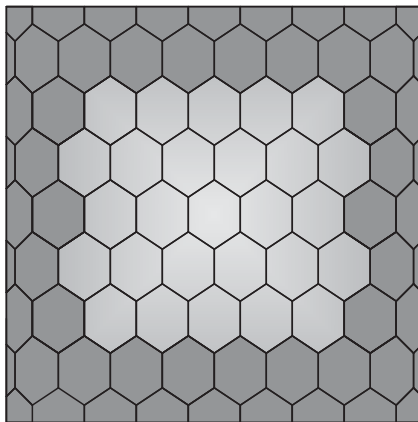


Figura 3.11 – Malha regular mostrando os volumes de controle laterais e centrais.

3.2.1.1 Testes com a função linear

Nas figuras 3.12 e 3.13 são apresentados os gráficos que mostram o comportamento dos valores da norma do erro do gradiente (ϵ_{grad}) nas malhas regulares utilizando-se a função linear. Os gráficos referentes ao mé-

todo dos mínimos quadrados e ao método utilizando a abordagem *vertex-based* com pseudolaplaciano (GGVBPL) não estão apresentados já que com esses métodos obteve-se gradientes exatos em todas as malhas. Observações relevantes aos resultados expostos nas referidas figuras são apresentadas através de campos do módulo do erro do gradiente em uma malha específica, sendo o erro dado pela equação (3.8). As figuras que mostram esses resultados apresentam na legenda, por simplificação, somente a palavra erro e não módulo do erro.

Uma observação muito importante deve ser feita antes que os resultados sejam detalhados. Analisando os passos dados para a obtenção da fórmula de Green-Gauss na seção 2.2, percebe-se que somente a partir da equação (2.6) as aproximações numéricas são efetivamente realizadas. Ao se considerar φ (pressão neste trabalho) uma função linear, uma particularidade é evidenciada ao se empregar a equação (2.6). O gradiente desta função é uniforme no volume de controle em análise e a aplicação da regra do ponto médio fornece o resultado exato da integral de superfície $\int_{\Delta_{\text{Sr}}} \varphi \, d\mathbf{S}$. A explicação para esta afirmação encontra-se no apêndice B.

Sendo assim, para esse caso a fórmula de Green-Gauss deixa de ser uma aproximação e o gradiente calculado a partir dela passaria a ser obtido de forma exata se o valor de pressão no centroide de cada face pudesse ser obtido de forma exata. Por consequência, o módulo do erro do gradiente nesse caso deveria ser nulo.

Para o caso dos métodos que utilizam mínimos quadrados, o gradiente calculado deveria também ter um valor exato com as funções lineares, já que nele se parte do princípio que há uma variação linear de pressão na vizinhança de um volume de controle.

Cada método de reconstrução é agora analisado individualmente com o intuito de se discutir os resultados apresentados nos gráficos das figuras 3.12 e 3.13.

Método GGCBA_1S

Conforme descrito na seção 2.2.1, ao se utilizar o método GGCBA_1S o valor da variável pressão no centroide f da face é calculado como uma média aritmética dos valores de pressão encontrados nos volumes de controle que cercam esta face. Como as malhas regulares apresentam volumes de controle distintos nas regiões do domínio, uma análise para cada ocasião deve ser realizada.

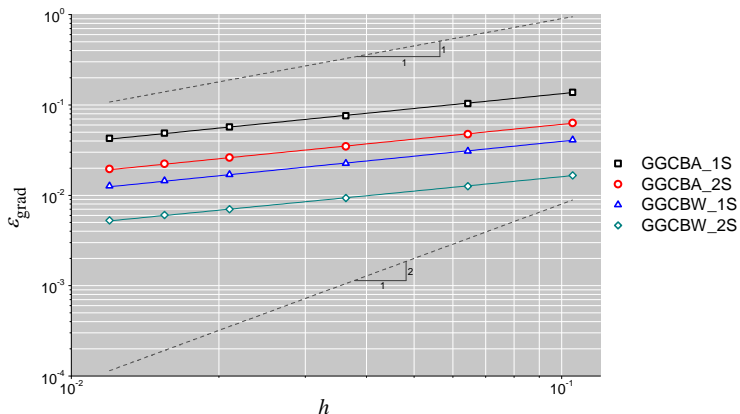


Figura 3.12 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares considerando a função linear. Métodos com abordagem *cell-based*.

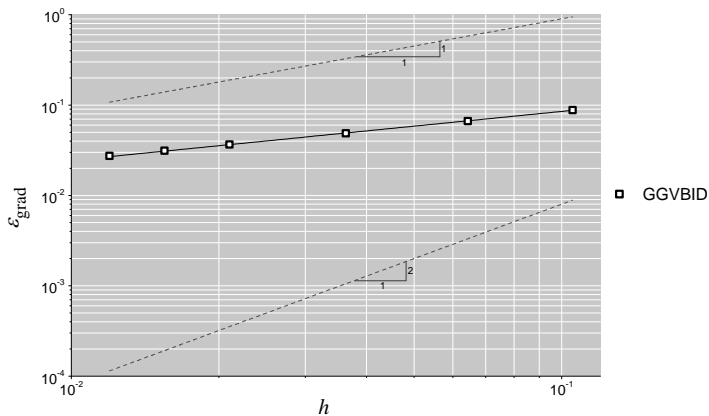


Figura 3.13 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares considerando a função linear. Método com abordagem *vertex-based*.

Os volumes centrais possuem o mesmo formato e dimensões, logo o centroide da face em comum entre eles encontra-se precisamente na metade da distância entre seus centroides. Basta verificar na figura 3.14 a disposição geométrica destas entidades, sendo $2d$ a distância entre os centroides dos volumes de controle e d a distância entre cada centroides e

o centroide da face.

Assim, como no método se calcula o valor de P_f considerando uma média aritmética, esse valor é o exato para a posição já que, segundo a função analisada, a pressão varia linearmente. Logo, sendo os fatores geométricos determinados com uma precisão adequada, deveriam ser obtidos valores exatos do gradiente utilizando a equação (2.8). Portanto, o erro ao calcular o gradiente nos volumes centrais deve ser nulo e a região a que eles pertencem não contribui em nada para os valores da norma do erro observados na figura 3.12.

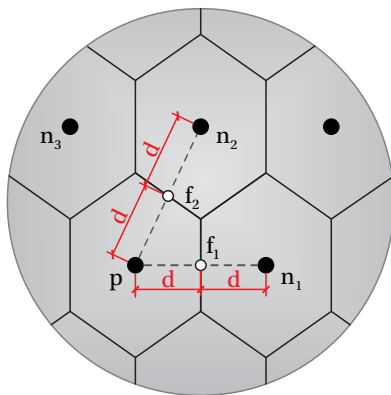


Figura 3.14 – Volumes centrais nas malhas regulares.

Já os volumes laterais apresentam-se deformados e assim, o exposto anteriormente não se aplica. Considerando dois volumes laterais p e n, conforme a figura 3.15, nota-se claramente que a distância entre o primeiro e f não é a mesma que entre o segundo e f. Devido a essa característica geométrica, o método GGCBA_1S é menos preciso ao calcular o gradiente já que a pressão corresponde a um local diferente do centroide de f. Surge-se assim um erro ao se empregar o referido método de reconstrução do gradiente.

A figura 3.16 mostra a distribuição do erro do gradiente na malha regular mais grosseira. Percebe-se uma faixa diferenciada nos volumes laterais, exatamente onde os erros se encontram, evidenciando a região assim como se apresenta na figura 3.11. Nos demais volumes de controle, os

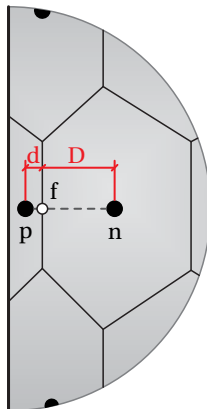


Figura 3.15 – Volumes laterais nas malhas regulares.

centrais, o campo do módulo do erro é nulo conforme explicação anterior.

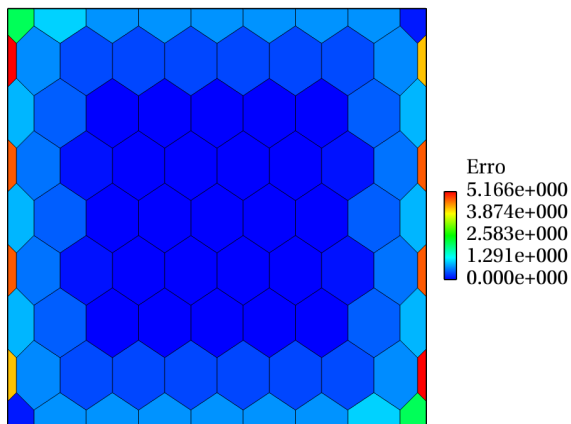


Figura 3.16 – Distribuição do erro na malha regular com 85 volumes de controle utilizando GGCB_A_1S.

Os resultados obtidos evidenciam que o método em questão é fortemente influenciado pela geometria da malha. Dentre os volumes laterais, o módulo do erro apresenta-se com um maior valor naqueles com menor quantidade de faces. Além de possuírem uma menor conectividade que os

demais, a influência da deformação nestes é ainda mais evidenciada.

Os quatro volumes de controle localizados nos cantos possuem a mesma geometria e disposição da vizinhança, porém, uma diferença na magnitude do erro é evidenciada entre eles. Observando aqueles localizados nos cantos inferior esquerdo e superior direito percebe-se que o módulo do erro associado é menor que nos outros dois. Aparentemente isso é devido ao tipo da função considerada, isto é, o ponto onde a pressão está sendo calculada nos referidos volumes de controle fornece um valor mais próximo do valor exato no ponto requerido f .

As figuras 3.17 e 3.18 ajudam a ilustrar o exposto anteriormente. Considerando a origem na posição mostrada na figura 3.1, as tabelas 3.6 e 3.7, referentes às figuras citadas, indicam as coordenadas e valores de pressão em alguns pontos de interesse, para os volumes de controle dos cantos inferior e superior esquerdo respectivamente. Nessas tabelas, f_1 , f_2 e f_3 são os centroides das faces internas dos volumes considerados, enquanto que A_1 , A_2 e A_3 são os pontos nos quais os valores aproximados por média aritmética seriam exatos. As faces das fronteiras não estão sendo consideradas já que, nestas, a pressão é obtida corretamente através da condição de contorno de Dirichlet.

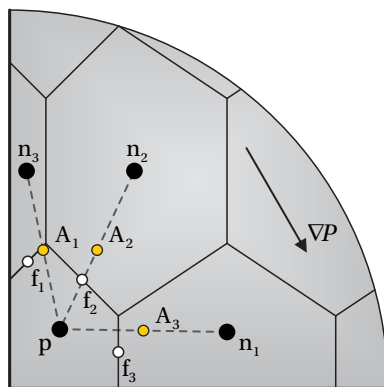


Figura 3.17 – Volume do canto inferior esquerdo da malha regular com 85 volumes de controle. Representação dos pontos fornecidos pelo método GGCBA_1S e do vetor gradiente da função linear.

Tabela 3.6 – Coordenadas e valores de pressão em alguns pontos associados ao volume de controle no canto inferior esquerdo.

	f_1	A_1	f_2	A_2	f_3	A_3
x	1.042	1.930	4.167	5.032	6.250	7.694
y	7.292	7.950	6.250	7.950	2.083	3.320
P	-16.666	-14.200	2.085	1.310	25.001	28.510

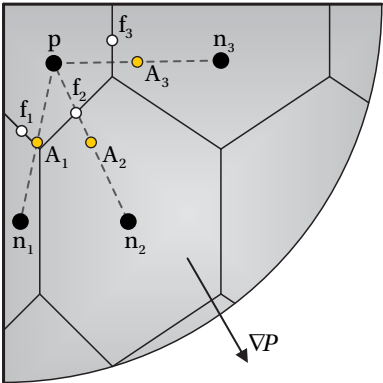


Figura 3.18 – Volume do canto superior esquerdo da malha regular com 85 volumes de controle. Representação dos pontos fornecidos pelo método GGCBA_1S e do vetor gradiente da função linear.

Pode-se observar nas figuras 3.17 e 3.18 que a distância entre f_1 e A_1 , entre f_2 e A_2 e entre f_3 e A_3 são as mesmas para ambos os volumes de controle considerados. Porém, devido à função linear analisada, os valores de pressão encontrados nos pontos A, associados ao volume de controle do canto inferior esquerdo, são mais próximos dos valores em cada uma de suas faces fazendo com que o erro de aproximação tenha uma menor

Tabela 3.7 – Coordenadas e valores de pressão em alguns pontos associados ao volume de controle no canto superior esquerdo.

	f_1	A_1	f_2	A_2	f_3	A_3
x	1.042	1.930	4.167	5.032	6.250	7.694
y	92.708	92.050	93.750	92.050	97.917	96.680
P	-272.914	-266.500	-260.415	-250.990	-262.501	-251.570

magnitude no referido volume de controle. Basta analisar os valores de pressão indicados nas tabelas 3.6 e 3.7, comparando-se as colunas de f e A correspondentes para confirmar o anteriormente exposto. A maior variação de pressão considerando o volume de controle superior esquerdo é justificada pelo fato de que, nesse caso, as linhas que unem os pontos f e A estão praticamente alinhadas com o vetor gradiente de pressão, conforme pode ser verificado na figura 3.18. Diferentemente, no volume inferior esquerdo tais linhas são praticamente ortogonais a esse vetor gradiente. Vale a pena ressaltar que os valores encontrados nas tabelas 3.6 e 3.7 estão em uma ordem 100 vezes maior do considerado no domínio quadrado unitário.

Apesar do campo exposto na figura 3.16 nos levar a pensar que o módulo do erro do gradiente no volume de controle do canto inferior esquerdo é um valor igual ao valor encontrado nos volumes centrais, no referido volume de controle tal valor é aproximadamente 0.16. Já o valor do módulo de ε_i no volume de controle do canto superior esquerdo é aproximadamente 2.15.

Conclui-se então através do método analisado que os erros associados estão concentrados nos volumes laterais fazendo com que, ao se refinar a malha, a convergência para tal situação não seja nem de primeira ordem (aproximadamente 0.54). O comportamento do campo do erro do gradiente em todas as malhas regulares é o mesmo, logicamente que com o refinamento a faixa de valores não-nulos de ε_i vai se tornando cada vez menor, diminuindo-se por consequência o valor da norma do erro associado.

Método GGCBA_2S

Deve-se lembrar que o método GGCBA_2S é uma extensão do método GGCBA_1S já que ele se utiliza dos resultados do gradiente calculados neste último para corrigir os valores de pressão nas faces.

Nos volumes laterais, o fato dos valores do gradiente possuírem um erro de aproximação agregado, devido ao emprego de GGCBA_1S, faz com que os valores corrigidos de pressão nos centroides das faces, apesar de serem mais próximos dos corretos, não sejam ainda os valores exatos. Consequentemente os novos gradientes de pressão nos referidos volumes de controle também são valores aproximados. Assim, os erros apesar de menores com relação ao método GGCBA_1S também estão presentes ao se

empregar GGCBA_2S.

Devido à correção do valor de pressão nos centroides das faces, até mesmo alguns volumes centrais, aqueles adjacentes aos laterais, são afetados pelos erros localizados nestes últimos. O que ocorre é que os gradientes de pressão nos referidos volumes centrais passam a apresentar um erro de aproximação, pois levam em consideração os gradientes incorretos de seus vizinhos para determinar os valores corrigidos nas faces. Com isso, os valores de P_f deixam de ser exatos, surgindo o erro de aproximação comentado ao se aplicar a equação (2.8).

Na figura 3.19 é mostrada a distribuição do erro do gradiente na malha com 85 volumes de controle, utilizando GGCBA_2S. O erro nos volumes laterais neste caso se difunde em direção aos volumes centrais afetando estes que são seus vizinhos. Isto ocorre devido à iteração feita para corrigir a P_f conforme explicado anteriormente. Na referida figura, devido aos limites da norma do erro apresentandos, essa difusão do erro não está claramente evidenciada contudo alterando-se essa faixa de valores o exposto é facilmente verificado.

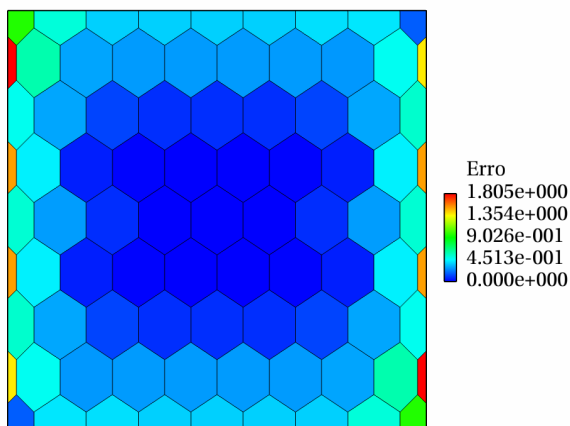


Figura 3.19 – Distribuição do erro na malha regular mais grosseira utilizando GGCBA_2S.

A fim de facilitar a comparação entre os dois métodos até agora analisados, a figura 3.20 mostra a distribuição do erro do gradiente utilizando-se GGCBA_2S e considerando a mesma faixa de valores apresentadas na figura 3.16. É visível a redução global do erro utilizando GGCBA_2S, consta-

tando-se que a correção do valor de pressão na face é uma possibilidade interessante para melhorar a reconstrução do gradiente. Isso também pode ser verificado na figura 3.12 onde se percebe que os valores da norma relacionados ao método com dois passos são menores que os valores empregando o método com apenas um passo. O valor da ordem de convergência, porém, é aproximadamente o mesmo, pois as linhas de convergência são praticamente paralelas.

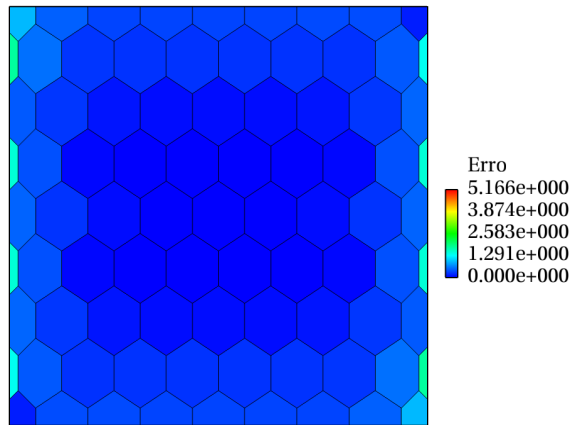


Figura 3.20 – Distribuição do erro na malha com 85 volumes utilizando GGCBW_2S. Mesma faixa de valores empregada na figura 3.16.

Método GGCBW_1S

Como neste método não é considerada apenas uma média aritmética para determinar os valores de pressão na face, os resultados aqui encontrados são mais próximos dos valores exatos. Sendo assim, a magnitude da norma do erro do gradiente é menor com relação aos métodos anteriores.

Novamente nos volumes centrais da malha o valor do gradiente de pressão obtido é o exato. Isso porque, devido à configuração geométrica regular, a interpolação considerada neste método coincide com a média aritmética, que, como se viu anteriormente, fornece valores exatos de pressão nas faces desses volumes de controle. A figura 3.21 mostra os vetores envolvidos no cálculo do fator de interpolação. Pelo fato de serem colineares e o módulo de um ser a metade do módulo do outro, dão origem a um fator de interpolação igual a $1/2$, como na média aritmética.

Porém, na figura 3.22 percebe-se que para os volumes laterais o vetor $\mathbf{r}_{p,n}$ não atravessa o ponto f . Conforme explicado na seção 2.2.1, para contornar esta característica geométrica realiza-se a projeção de $\mathbf{L}_{p,f}$ sobre $\mathbf{r}_{p,n}$ sendo a pressão então calculada no ponto f' . É devido a esta projeção que surge o erro na determinação da pressão no centroide da face e, por consequência, no gradiente do volume de controle envolvido.

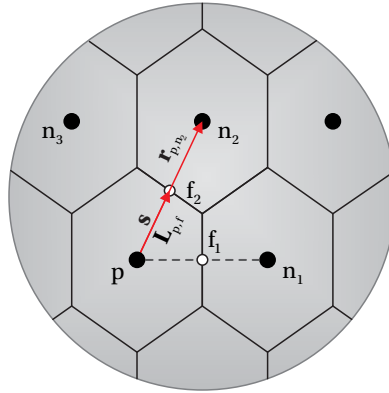


Figura 3.21 – Volumes centrais nas malhas regulares analisando o método GGCBW_1S.

O módulo do erro em cada volume de controle é demonstrado na figura 3.23, para a malha regular com 85 volumes de controle. Nota-se, assim como no método GGCBW_1S, uma faixa diferenciando os volumes centrais e laterais, aqui mais ainda evidenciada. A faixa de valores da norma do erro, menor que nos dois casos até aqui apresentados, evidencia que a aproximação com a ponderação pela distância é mais precisa entre as analisadas até aqui.

Método GGCBW_2S

Nesta variante, em que os valores aproximados nas faces são corrigidos em um segundo passo, observa-se uma redução dos valores do erro em relação ao procedimento com um único passo. De fato, como se pode evidenciar na figura 3.12, o nível dessa redução é similar ao que tinha sido observado entre as variantes de um e dois passos utilizando média aritmética. Apesar de o método GGCBW_2S apresentar o menor nível de

erro entre os métodos *cell-based* considerados, as ordens de convergência de todos eles são praticamente idênticas.

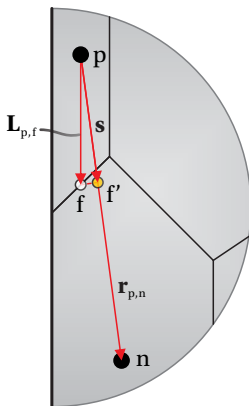


Figura 3.22 – Volumes laterais nas malhas regulares analisando o método GGCBW_1S.

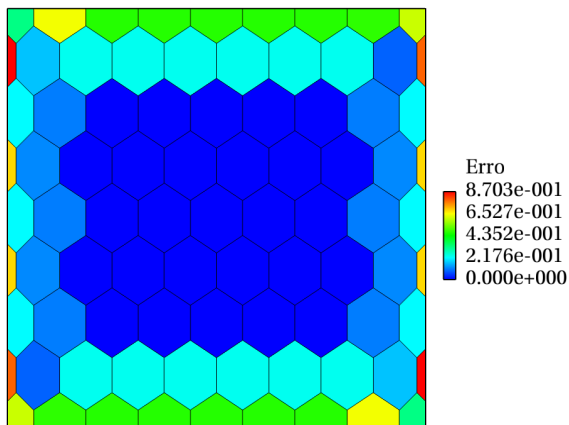


Figura 3.23 – Distribuição do erro na malha com 85 volumes de controle utilizando GGCBW_1S.

Método GGVBID

Conforme descrito anteriormente, a principal característica dos métodos com abordagem *vertex-based* é determinar os valores de pressão nos centroides das faces utilizando os valores previamente determinados nos vértices da malha. A obtenção destes se dá combinando os valores de pressão nos volumes de controle circundantes considerando algum tipo de ponderação. Para o caso do método GGVBID cada fator de ponderação é definido como o inverso da distância entre o vértice em questão e o centroide do volume de controle correspondente.

Devido à uniformidade dos volumes centrais nas malhas regulares, as pressões obtidas nos vértices na região central são os valores exatos para estas posições. Como para esses volumes os vértices estão a uma mesma distância dos centroides dos volumes vizinhos, a média ponderada pela distância torna-se uma média aritmética, que, pela linearidade da função considerada, coincide com o valor exato. Sendo assim, os valores depois calculados nos centroides das faces serão também exatos, de modo que ao aplicar a equação (2.8) os erros de aproximação do gradiente tornam-se nulos para os volumes centrais.

Este fato não ocorre nos volumes laterais já que estes não possuem a uniformidade dos volumes centrais. Portanto, os valores de pressão imprecisos nos centroides das faces destes volumes de controle induzem a valores inexatos do gradiente de pressão. É nesta região que se encontram os erros na aproximação do gradiente, como se pode observar na figura 3.24, que apresenta a distribuição do erro para a malha regular mais grosseira.

Mesmo com um procedimento mais elaborado para a determinação de P_f , o erro empregando o método GGVBID é de uma magnitude comparável ao erro encontrado com os métodos GGCBA_1S e GGCBA_2S, como se pode observar nas figuras 3.12 e 3.13.

Método GGVBPL

A convergência do método GGVBPL não é mostrada na figura 3.13 pois o método fornece valores de gradiente exatos em todo o domínio, no caso da pressão variar de forma linear. Essa propriedade surge do fato que, tanto a aproximação dos valores nos vértices, quanto a posterior aproximação dos valores nas faces, possuem precisão de segunda ordem. Isso quer dizer que o erro envolvido nessas aproximações, para uma função arbitrá-

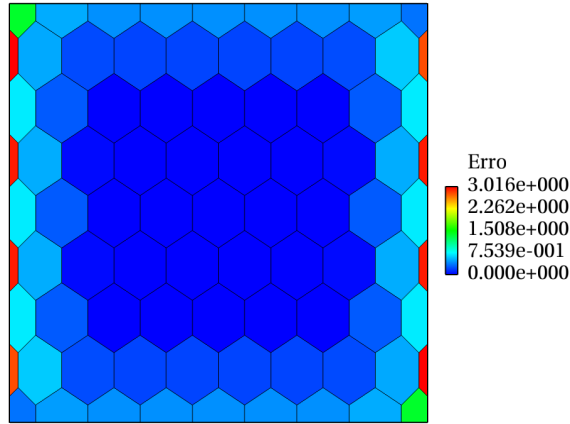


Figura 3.24 – Distribuição do erro na malha regular com 85 volumes de controle utilizando GGVBID.

ria, é proporcional ao quadrado da dimensão característica e às segundas derivadas da função considerada. Como no caso analisado a função é linear, as derivadas segundas são todas nulas, resultando que os valores da pressão nos centroides das faces tornam-se exatos utilizando as formas de aproximação consideradas. A substituição desses valores na fórmula de Green-Gauss fornece, portanto, valores exatos também.

Método dos mínimos quadrados

Da mesma forma que o método GGVBPL, o método dos mínimos quadrados, independentemente do fator peso associado (LSID, LSSID e LSUN), fornece valores exatos do gradiente para uma variação linear da pressão no domínio. Por este motivo o gráfico de convergência associado aos métodos de mínimos quadrados também não é apresentado.

3.2.1.2 Testes com a função oscilatória

Nas figuras 3.25, 3.26 e 3.27 são apresentados os gráficos que mostram a redução da norma do erro considerando valores de pressão gerados com a função oscilatória definida na equação (3.2).

Percebe-se que ao se modificar a função analisada os resultados encontrados diferem daqueles obtidos com a função linear. Os volumes cen-

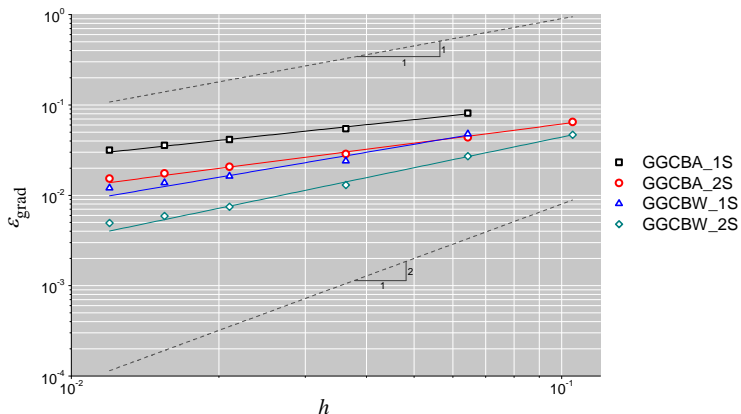


Figura 3.25 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função oscilatória. Métodos com abordagem *cell-based*.

trais que apresentavam soluções exatas ao se utilizar os métodos com abordagem *cell-based*, não apresentam mais essa particularidade ao se considerar a função oscilatória. Porém, observando a figura 3.25 percebe-se que, ao se refinar a malha a norma do erro decresce com maior intensidade.

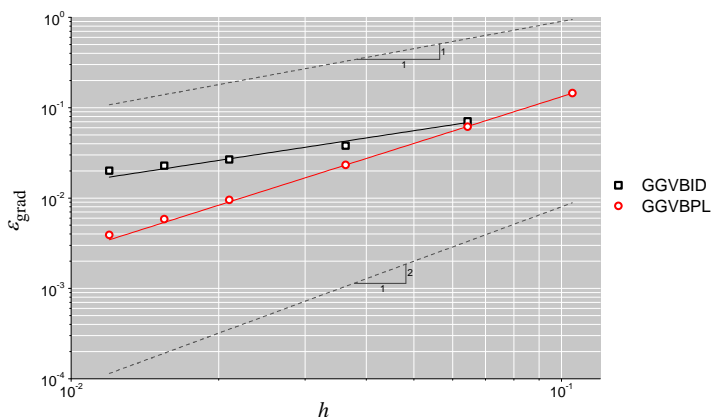


Figura 3.26 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função oscilatória. Métodos com abordagem *vertex-based*.

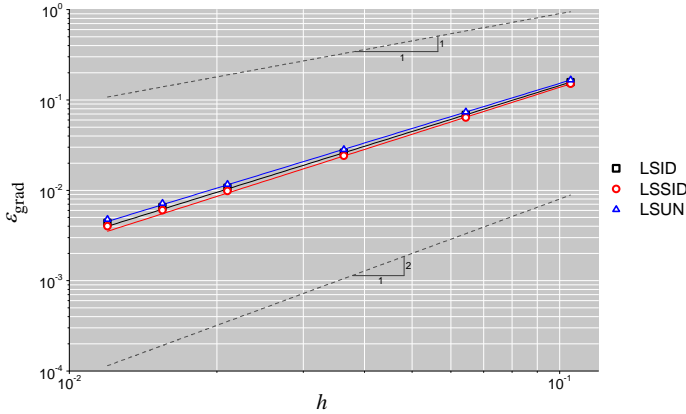


Figura 3.27 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função oscilatória. Métodos utilizando mínimos quadrados.

Como a função considerada não é linear, os métodos GGVBPL e todos os baseados nos mínimos quadrados já não apresentam mais a norma do erro nula. Através dos gráficos expostos nota-se que os métodos que se sobressaem com relação à abordagem *cell-based* são o GGCBW_1S e GGCBW_2S. Utilizando a abordagem *vertex-based* fica evidente que o método GGVBPL apresenta maior precisão, sendo que a redução do erro está quase paralela à linha de referência associada a uma convergência de segunda ordem. Por fim, utilizando mínimos quadrados, apesar da similaridade, o LSSID se destaca levemente. A ordem de convergência do gradiente de pressão é maior no método LSSID, valor de 1.73 aproximadamente. O método GGVBPL apresenta uma ordem de convergência bastante próxima à do método LSSID. Já para os métodos GGCBW_1S e GGCBW_2S a convergência da norma do erro ocorre a uma taxa próxima a de primeira ordem.

A distribuição do erro com a função oscilatória é qualitativamente semelhante à mostrada anteriormente para a função linear, com os erros maiores concentrados na vizinhança das fronteiras. Porém, como já mencionado, na região central os erros não são mais nulos, como acontecia com a função linear.

3.2.1.3 Testes com a função exponencial

Nas figuras 3.28, 3.29 e 3.30 são mostrados os gráficos obtidos para a redução da norma do erro considerando a pressão variando segundo a função exponencial definida na equação (3.3).

A figura 3.28, correspondente aos métodos com abordagem *cell-based*, mostra que a convergência para todos eles considerando a função exponencial é menor que de primeira ordem. Um comportamento similar é apresentado com o método GGVBID, que também mostra uma convergência menor à primeira ordem. Entretanto, o outro método *vertex-based* considerado, o GGVBPL, apresenta uma convergência próxima à segunda ordem, como se pode ver na figura 3.29. Já os métodos de mínimos quadrados mostram um comportamento similar entre eles, também com um inclinação intermediária entre primeira e segunda ordem.

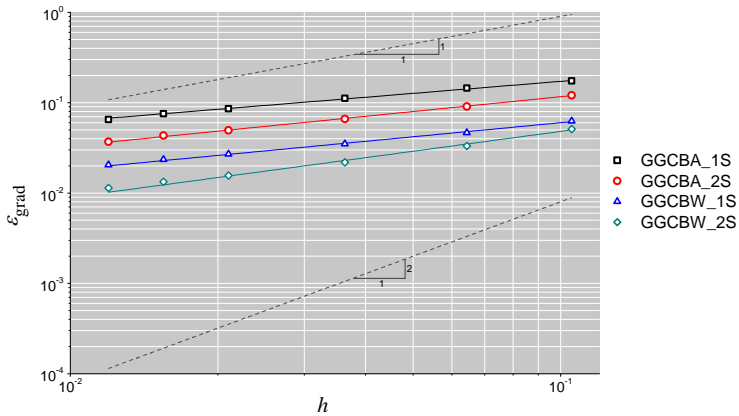


Figura 3.28 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função exponencial. Métodos com abordagem *cell-based*.

Quanto à distribuição do erro do gradiente, mais uma vez a concentração dos maiores valores se dá nos volumes de controle laterais. Dentre os volumes centrais, nota-se que os maiores valores estão localizados próximos ao canto superior esquerdo do domínio, onde se encontram os maiores valores do gradiente de pressão.

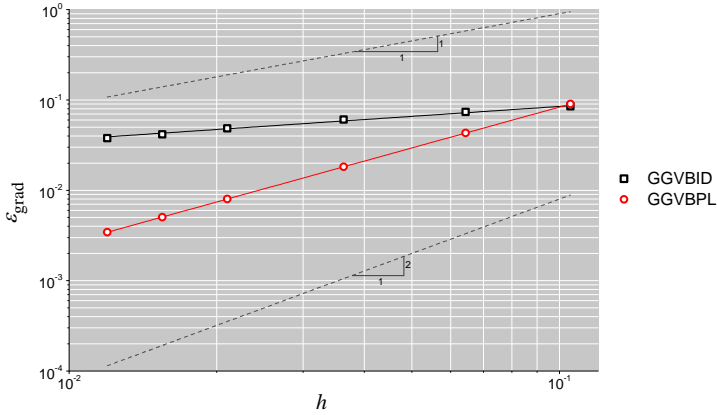


Figura 3.29 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função exponencial. Métodos com abordagem *vertex-based*.

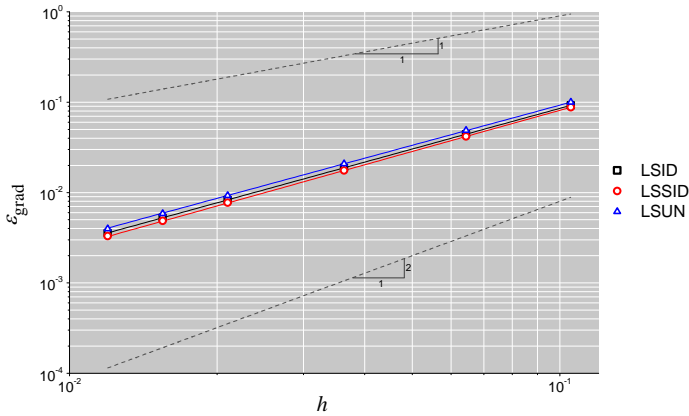


Figura 3.30 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função exponencial. Métodos utilizando mínimos quadrados.

3.2.1.4 Testes com a função descontínua

A função definida pela equação (3.4) apresenta uma descontinuidade na derivada normal à linha média $x = 1/2$. Essa situação seria típica de um escoamento em meios porosos em que a permeabilidade fosse descontí-

nua através dessa linha. O intuito dos testes nesta seção é precisamente verificar o comportamento dos métodos de reconstrução do gradiente nessa situação. As figuras 3.31, 3.32 e 3.33 exibem os valores da norma do erro do gradiente de pressão com o refinamento da malha regular ao se empregar a função descontínua.

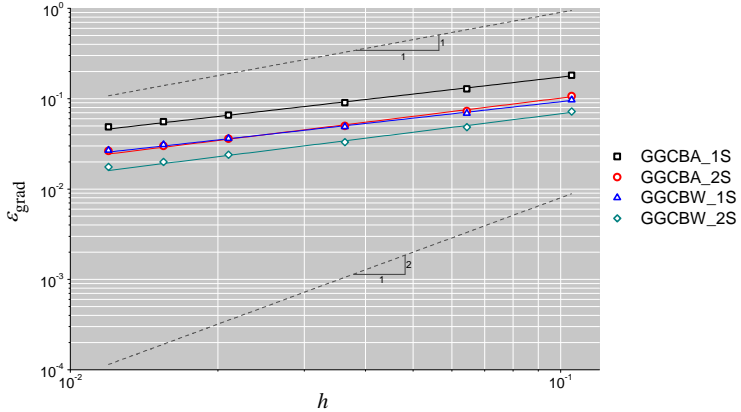


Figura 3.31 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função descontínua. Métodos com abordagem *cell-based*.

Devido à característica da função analisada, a derivada normal à linha $x = 1/2$ não está definida. Como alguns volumes de controle das malhas regulares apresentam seu centroide exatamente em $x = 1/2$, para obter o valor do gradiente analítico nesta posição determinou-se a derivada parcial da pressão com relação ao eixo x através de uma média aritmética das derivadas parciais com relação a este eixo, considerando todo o domínio apresentado na equação (3.4).

Com a função descontínua os valores da norma do erro são os maiores encontrados até agora, considerando os métodos de reconstrução destacados nas funções anteriores, GGCBW_1S, GGCBW_2S, GGVBPL e aqueles que utilizam mínimos quadrados. Analisando os gráficos expostos, pode-se verificar que com nenhum dos métodos obteve-se valores da norma do erro menores que 10^{-2} e que os valores da ordem de convergência são próximos em todos esses métodos, entre 0.60 e 0.71. Com isso conclui-se que nenhum dos métodos se sobressai e que estes apresentam dificuldades ao se tratar uma possível descontinuidade no domínio.

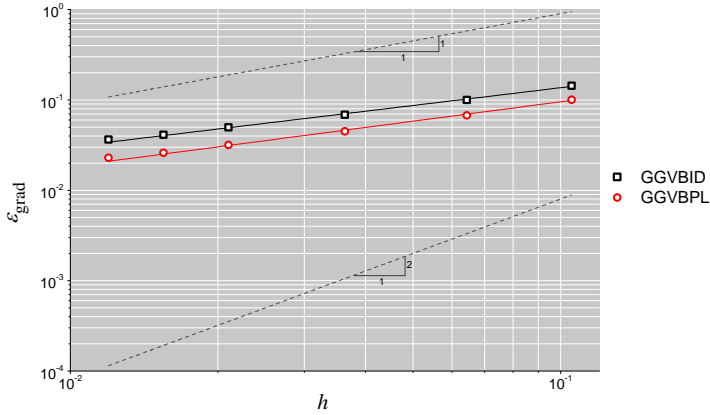


Figura 3.32 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função descontínua. Métodos com abordagem *vertex-based*.

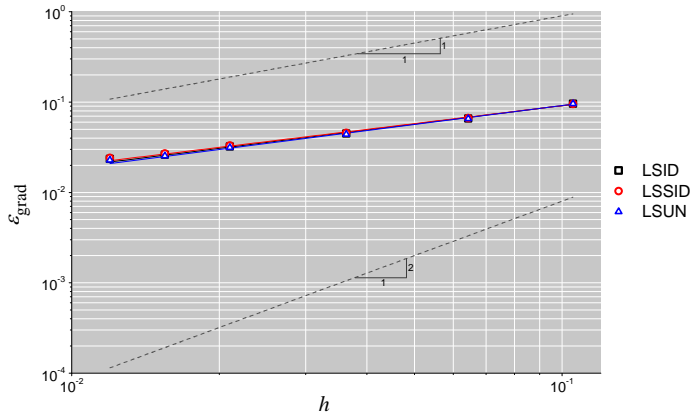


Figura 3.33 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas regulares com a função descontínua. Métodos utilizando mínimos quadrados.

Analisando a distribuição do erro do gradiente de pressão na figura 3.34 verifica-se que elevados valores deste erro localizam-se nos volumes cujos centroides se encontram na linha média $x = 1/2$ ou que possuem uma face sobre esta. Os maiores valores do erro encontram-se nos volumes dispostos onde a descontinuidade é mais evidente sendo que, naqueles

que são adjacentes à linha média, a aproximação numérica do gradiente é realizada considerando-se os valores discretos de pressão de volumes localizados em todo domínio analisado na equação (3.4), já o gradiente analítico é determinado levando em conta apenas um subdomínio desta equação. O volume de controle com maior erro agregado além de estar localizado na região de descontinuidade, apresenta um menor número de volumes vizinhos com relação à maioria dos volumes da malha.

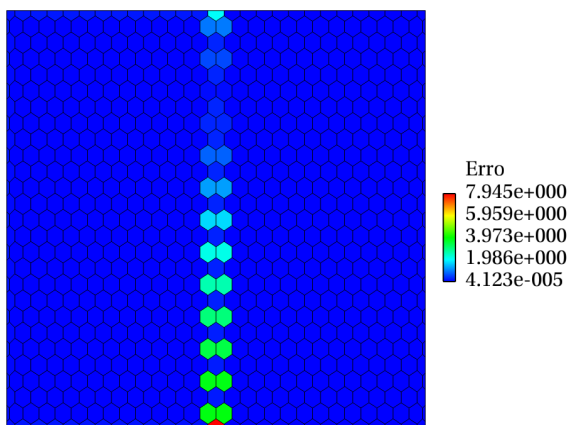


Figura 3.34 – Distribuição do erro na malha com 742 volumes de controle utilizando LSSID. Função descontinua.

3.2.1.5 Comentários

Apesar de não se ter encontrado valores da norma do erro e da ordem de convergência b idênticos ao se variar cada função empregada nas malhas regulares, a conclusão ao se verificar os resultados é a mesma, ou seja, os métodos que se destacaram foram GGCBW_1S e GGCBW_2S considerando a abordagem *cell-based*, GGVBPL considerando a abordagem *vertex-based* e por fim LSSID empregando mínimos quadrados (apesar da grande similaridade com relação aos demais).

3.2.2 Testes com diferentes malhas

Analísada a influência das diferentes funções sobre os erros na reconstrução do gradiente considerando as malhas regulares, parte-se agora

para a análise do efeito das características geométricas de diferentes malhas sobre estes erros. A ideia é isolar o efeito de cada uma destas particularidades na convergência dos métodos e também na magnitude da norma do erro do gradiente. Deve ser ressaltado que as diferentes malhas utilizadas nos testes a seguir se encontram na seção 3.1.2 e que a função a ser considerada é a oscilatória, apresentada na equação (3.2).

3.2.2.1 Testes com as malhas não-conformes

Na malha mostrada na figura 3.10 (b), se na interface entre regiões as faces dos volumes maiores forem divididas em duas para coincidir exatamente com as faces dos volumes menores, obter-se-ia uma malha conforme. Como em uma malha poligonal, os volumes podem ter um número arbitrário de faces, não seria necessário nenhum tratamento especial para os volumes resultantes com cinco faces. Essa é uma das vantagens adicionais de se considerar formulações numéricas aptas para lidar com volumes poligonais. Possivelmente esta situação aconteça quando se analisar o conjunto poço-reservatório, na região de transição entre a malha poligonal e a malha *corner-point*.

Os volumes de controle localizados na interface entre as duas regiões mencionadas merecem uma atenção especial. Aqueles com o maior tamanho são considerados constituídos por cinco faces, como pode ser visto na figura 3.35. Já os volumes com menor tamanho apresentam quatro faces, assim como nos demais volumes de controle afastados da interface. A aproximação do gradiente segundo a abordagem *cell-based* para o volume de controle p, apresentado na figura 3.35, considera os valores de pressão em p e nos seus cinco volumes vizinhos para se determinar a pressão nas faces, assim como foi explicado na seção 2.2.1. Já para o outro volume p, também localizado na interface porém com menor tamanho, mostrado na figura 3.36, devem ser considerados os valores de pressão no próprio volume e nos seus quatro volumes de controle vizinhos.

A mesma análise, de considerar os volumes vizinhos ao volume em questão, é realizada ao se empregar os métodos que utilizam mínimos quadrados. Sendo assim, o estêncil para se determinar o gradiente nos volumes de controle localizados na interface pode variar dependendo do método empregado.

Os valores de pressão nos vértices, necessários ao se considerar a abordagem *vertex-based*, são obtidos de maneira distinta na interface já

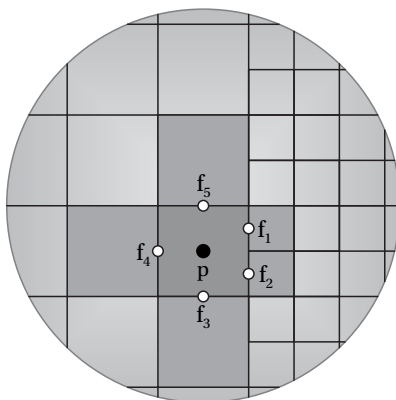


Figura 3.35 – Faces do volume de controle p localizado na interface.

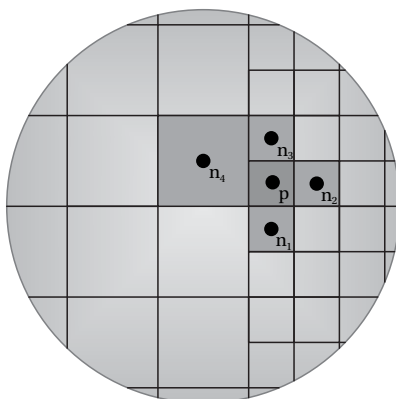


Figura 3.36 – Volumes de controle vizinhos a um volume de menor tamanho na interface.

que o número de volumes adjacentes a eles varia entre três e quatro. A figura 3.37 mostra que para se determinar o valor de pressão nos vértices v_1 e v_3 devem ser considerados os valores associados aos quatro volumes circundantes. Para o vértice v_2 apenas três são os volumes adjacentes.

Depois de algumas particularidades das malhas não-conformes serem discutidas, finalmente os resultados as empregando são apresentados. Nas figuras 3.38, 3.39 e 3.40 são exibidos gráficos que mostram a redução

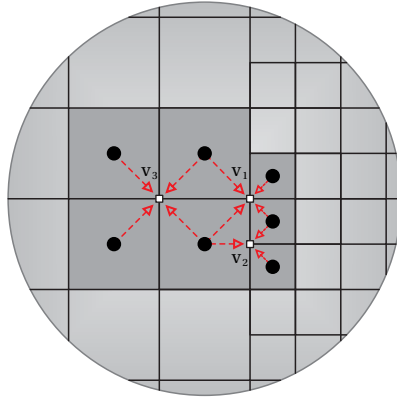


Figura 3.37 – Volumes adjacentes aos vértices v_1 , v_2 e v_3 .

do erro do gradiente considerando-se a função oscilatória na sequência de malhas não-conformes antes mencionada. Percebe-se que o método que se destaca é o GGVBPL, apresentando uma convergência aproximadamente de segunda ordem, seguido dos métodos que utilizam mínimos quadrados. A convergência é aproximadamente de primeira ordem nos métodos GGCBW_1S e GGCBW_2S, apresentando o último uma ordem de convergência levemente superior. Esses dois métodos se destacam dentre os métodos com abordagem *cell-based*.

Na figura 3.40 verifica-se que a ponderação pela distância não influencia de maneira significativa os resultados com relação aos métodos que utilizam mínimos quadrados. Excluindo os volumes localizados na interface, os demais volumes são iguais aos seus vizinhos, logo a distância entre eles é sempre a mesma não sendo necessária tal ponderação.

3.2.2.2 Testes com as malhas com razão de aspecto alta

Nas figuras 3.41, 3.42 e 3.43 encontram-se os resultados da norma do erro do gradiente de pressão para a análise da convergência considerando a sequência de malhas com razão de aspecto alta.

Os resultados obtidos considerando a abordagem *cell-based* mostram mais uma vez que os métodos GGCBW_1S e GGCBW_2S apresentam os melhores resultados com relação aos valores da norma do erro do gradiente. Quanto à ordem de convergência, todos esses métodos apresentam

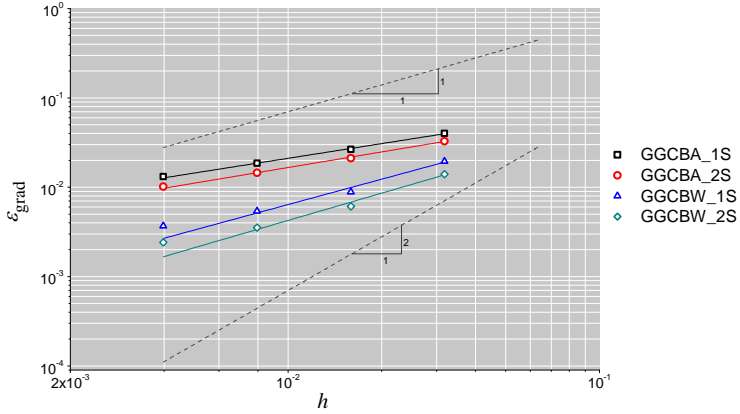


Figura 3.38—Convergência do gradiente de pressão nas malhas não-conformes. Métodos com abordagem *cell-based*.

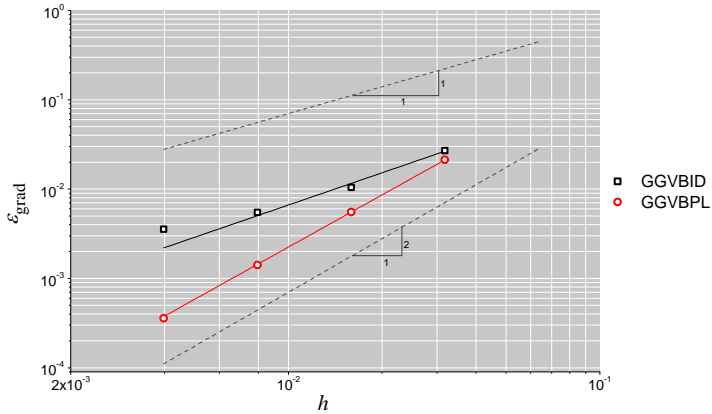


Figura 3.39—Convergência do gradiente de pressão nas malhas não-conformes. Métodos com abordagem *vertex-based*.

um valor similar, notoriamente menor que um.

Os métodos com abordagem *vertex-based* apresentam resultados distintos com relação às demais malhas analisadas em conjunto com a função oscilatória. Percebe-se no gráfico da figura 3.42 que o comportamento de ambas as variantes do método é parecido, sendo o desempenho do método GGVBPL levemente melhor. Nas demais malhas é clara a superioridade

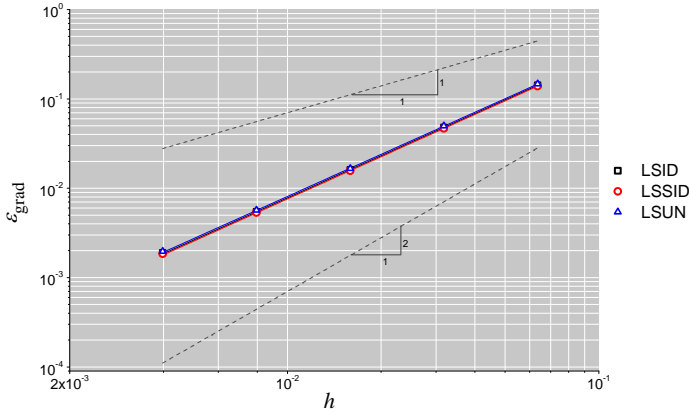


Figura 3.40 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas não-conformes. Métodos utilizando mínimos quadrados.

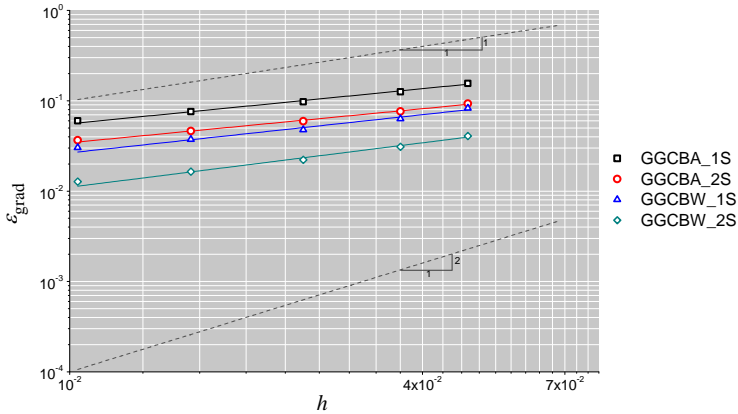


Figura 3.41 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com razão de aspecto alta. Métodos com abordagem *cell-based*.

deste último método.

Analisando o gráfico da figura 3.43 percebe-se que a reconstrução do gradiente nas malhas com razão de aspecto alta é sensível à ponderação pela distância. Ao se comparar o LSUN (método que não considera ponderação) e o LSID (método que considera a ponderação pelo inverso da distância) nota-se que além dos valores do erro ficarem menores para

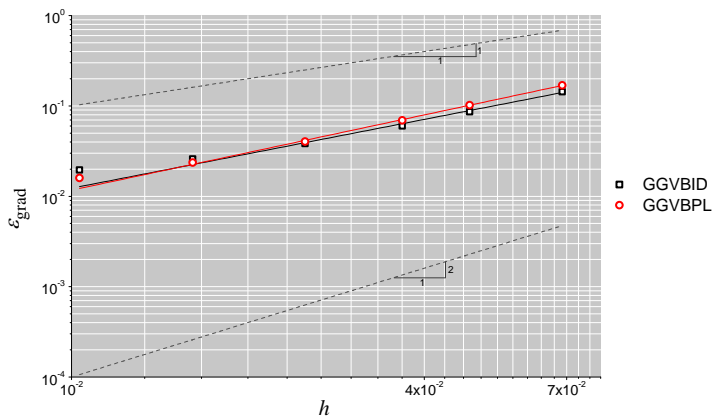


Figura 3.42 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com razão de aspecto alta. Métodos com abordagem *vertex-based*.

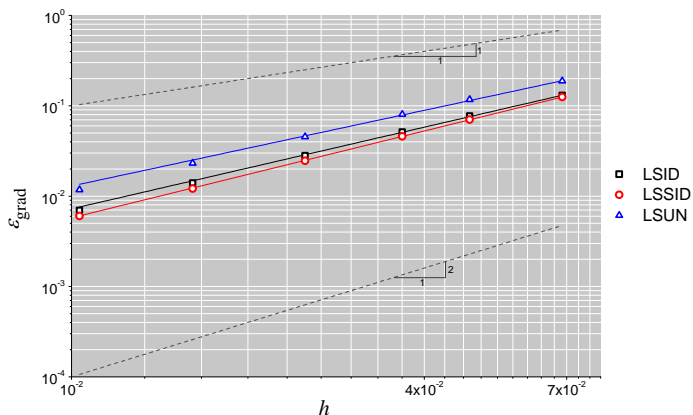


Figura 3.43 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com razão de aspecto alta. Métodos utilizando mínimos quadrados.

este último, a ordem de convergência é levemente maior. Considerando-se todos os métodos que utilizam os mínimos quadrados fica claro que aquele que se destaca é o LSSID, no qual a ponderação se dá pelo quadrado da distância.

Os métodos que utilizam mínimos quadrados apresentam os maiores valores de ordem de convergência dentre todos os métodos analisados,

com destaque para LSSID cujo valor é aproximadamente 1.60.

Ao examinar o campo do módulo do erro do gradiente considerando todos os métodos de reconstrução, percebe-se que os maiores valores do erro concentram-se nos volumes localizados nas fronteiras do domínio. Isto já era esperado pois são nessas regiões que os volumes de controle apresentam-se com uma maior deformação. Para os métodos que utilizam mínimos quadrados, que não dependem da geometria dos volumes de controle da malha, os maiores erros ali se encontram pois esses volumes apresentam um menor número de vizinhos com relação aos demais.

3.2.2.3 Testes com as malhas com distorção aleatória

As figuras 3.44, 3.45 e 3.46 exibem os valores da norma do erro do gradiente de pressão para as malhas com distorção aleatória.

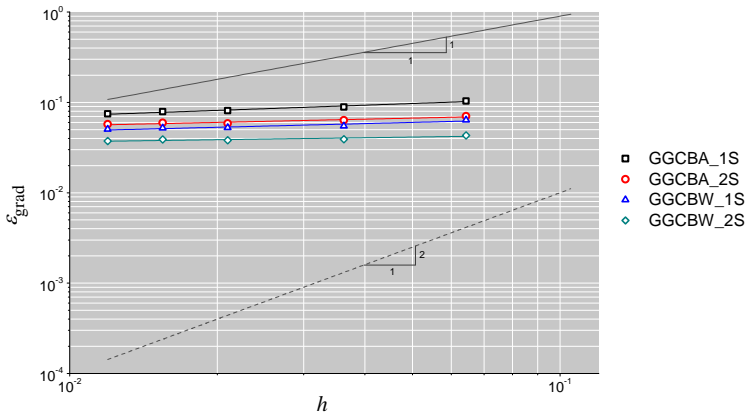


Figura 3.44 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção aleatória. Métodos com abordagem *cell-based*.

O gráfico referente aos métodos com abordagem *cell-based* mostra que nenhum dos métodos consegue tratar de maneira adequada as malhas com volumes distorcidos. O declínio do valor da norma do erro com o refinamento é bastante reduzido neste caso, sendo a linha de tendência uma reta praticamente horizontal para os quatro métodos.

Os resultados referentes aos métodos com abordagem *vertex-based*, apresentados na figura 3.45, mostram que o método GGVBID também apresenta uma ordem de convergência baixa. A inclinação da reta é um

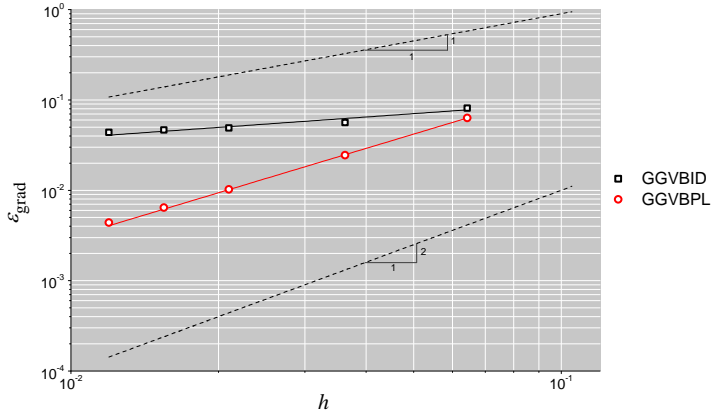


Figura 3.45 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção aleatória. Métodos com abordagem *vertex-based*.

pouco mais acentuada que com os métodos com abordagem *cell-based*, porém, a convergência está ainda longe de ser de primeira ordem. Já o método GGVBPB exibe um melhor desempenho com relação à convergência, apresentando uma ordem de convergência de 1.63, aproximadamente.

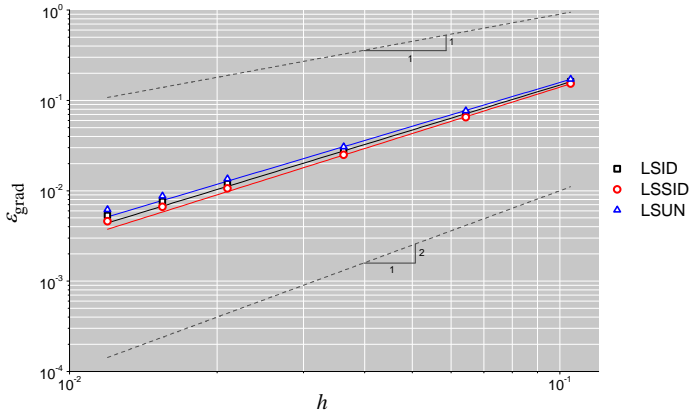


Figura 3.46 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção aleatória. Métodos utilizando mínimos quadrados.

Examinando a figura 3.46, nota-se que os métodos que utilizam mínimos quadrados não são afetados pela distorção das malhas. Este compor-

tamento já era esperado, pois conforme comentado no capítulo anterior, tais métodos não são influenciados pela geometria dos volumes de controle. O método LSSID apresenta uma leve vantagem sobre os demais com relação ao valor da ordem de convergência (1.71 aproximadamente).

3.2.2.4 Testes com as malhas com distorção senoidal

Nas figuras 3.47, 3.48 e 3.49 encontram-se os gráficos que exibem o comportamento da norma do erro do gradiente para as malhas com distorção senoidal.

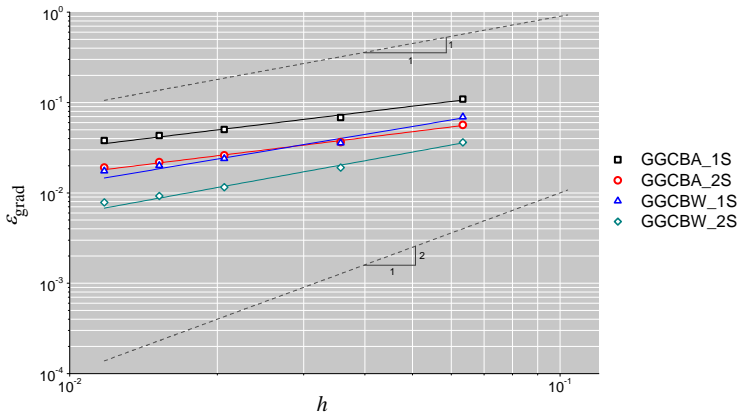


Figura 3.47 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção senoidal. Métodos com abordagem *cell-based*.

Os gráficos das figuras 3.47 e 3.48 mostram que a distorção em análise não teve uma grande influência nos resultados, assim como se percebeu nas malhas com distorção aleatória. Até mesmo os métodos com abordagem *cell-based* apresentam resultados razoáveis ao serem comparados com os resultados obtidos nas malhas regulares (analisando a mesma função oscilatória). Novamente, como nas demais malhas, os métodos que se destacam com relação à ordem de convergência e magnitude da norma do erro são GGCBW_1S, GGCBW_2S, GGVBPL e LSSID.

Com o objetivo de mostrar a influência da distorção dos volumes de controle na convergência dos métodos de reconstrução do gradiente, os resultados das ordens de convergência b bem como da constante a encontrados nas malhas regulares foram comparados com aqueles encontrados

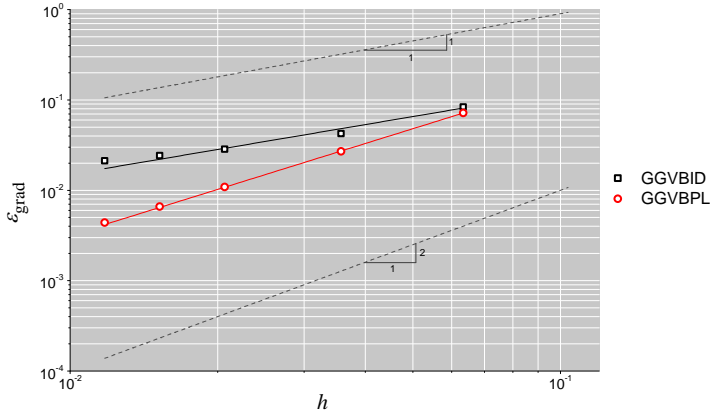


Figura 3.48 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção senoidal. Métodos com abordagem *vertex-based*.

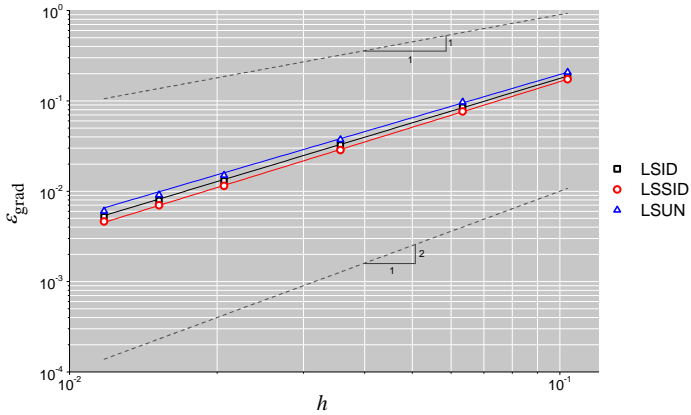


Figura 3.49 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas com distorção senoidal. Métodos utilizando mínimos quadrados.

nas malhas com distorção aleatória e senoidal. Vale a pena ressaltar que a função analisada para todos os tipos de malhas é a oscilatória e que tanto a ordem b como a constante a fazem parte da equação (3.11).

Os valores estão expostos na tabela 3.8. Essa comparação é possível porque as malhas com distorção aleatória e senoidal derivam das malhas-base regulares. As siglas têm seu significado nas tabelas 3.4 e 3.5.

Tabela 3.8 – Valores da constante a e da ordem de convergência b obtidos nas malhas regulares, com distorção aleatória e senoidal.

	RE		DA		DS	
	a	b	a	b	a	b
GGCBA_1S	0.39	0.58	0.17	0.19	0.66	0.66
GGCBA_2S	0.31	0.70	0.10	0.12	0.35	0.67
GGCBW_1S	0.57	0.92	0.09	0.13	0.82	0.91
GGCBW_2S	0.59	1.13	0.05	0.07	0.54	0.99
GGVBID	0.66	0.83	0.22	0.38	1.02	0.92
GGVBPL	6.89	1.72	5.54	1.63	7.53	1.69
LSID	7.05	1.69	6.68	1.65	7.62	1.63
LSSID	7.37	1.73	7.10	1.70	7.71	1.67
LSUN	6.93	1.66	6.46	1.61	7.57	1.59

Analisando as colunas referentes aos valores das ordens de convergência das malhas regulares e com distorção aleatória, percebe-se que os métodos com abordagem *cell-based* assim como o método GGVBID não podem ser recomendados para se tratar estas últimas. Os baixos valores de b evidenciam a deficiência já observada nos gráficos referentes a esses tipos de malha.

Em contrapartida, os métodos GGVBPL e os que utilizam mínimos quadrados são insensíveis a tal distorção. Basta verificar a proximidade dos valores das ordens de convergência na tabela 3.8. Para os referidos métodos, ao se analisar também a constante a , encontram-se valores maiores da norma do erro nas malhas com distorção aleatória.

Comparando-se as colunas referentes às ordens de convergência das malhas regulares e com distorção senoidal, não se verificam alterações significativas dos valores de b nos métodos analisados. Isto nos leva a concluir que esse tipo de distorção pouco influencia a convergência dos métodos. Ao se analisar também a constante a , os valores da norma do erro nas malhas regulares são menores em comparação aos valores referentes às malhas com distorção senoidal.

A fim de complementar a análise anterior, a distribuição do erro do gradiente nas malhas regulares, com distorção senoidal e aleatória são apresentados nas figuras 3.50, 3.51 e 3.52, respectivamente. Para o método GGCBW_2S analisado, percebe-se a influência da distorção no sentido que

o número de volumes de controle com erros mais elevados aumenta da malha regular até a malha com distorção aleatória. Esse fato faz com que a norma do erro aumente seu valor, ficando evidente a influência da distorção das malhas nos resultados dos métodos de reconstrução do gradiente.

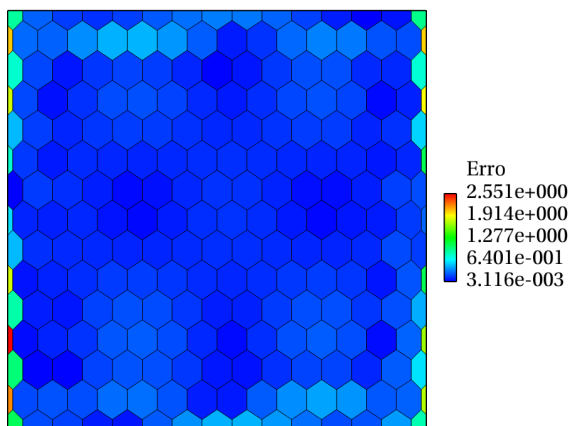


Figura 3.50 – Distribuição do erro na malha regular com 232 volumes de controle utilizando GGCBW_2S.

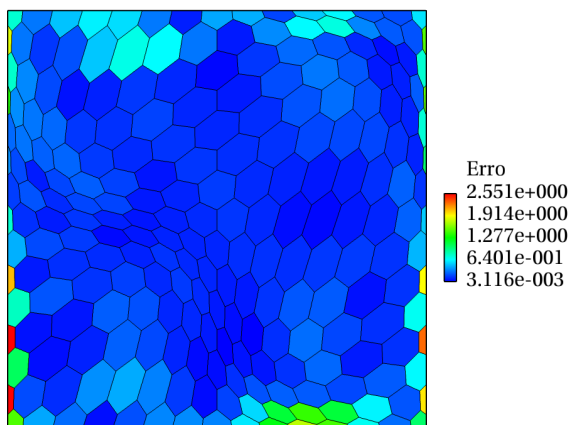


Figura 3.51 – Distribuição do erro na malha com distorção senoidal com 232 volumes de controle e utilizando GGCBW_2S.

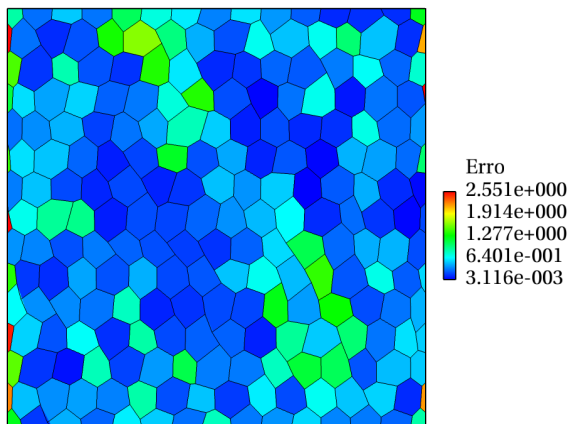


Figura 3.52 – Distribuição do erro na malha com distorção aleatória com 232 volumes de controle utilizando GGCBW_2S.

3.2.2.5 Comentários

Analizados os gráficos referentes às malhas não-conformes, com razão de aspecto alta, com distorção aleatória e senoidal pode-se concluir que os métodos que apresentam os melhores resultados com relação à ordem de convergência são os mesmos apontados quando se analisou a influência das diferentes funções na aproximação do gradiente. Assim, como conclusão final referente aos resultados numéricos da aproximação do gradiente, os métodos que se sobressaem são GGCBW_1S, GGCBW_2S para aqueles com abordagem *cell-based*, GGVBPL para aqueles com abordagem *vertex-based* e LSSID para aqueles que utilizam mínimos quadrados. De forma global, GGVBPL e LSSID se destacaram apresentando os melhores resultados independentemente do tipo de malha.

A fim de poder comparar os quatro métodos citados de forma mais clara, em cada uma das figuras 3.53, 3.54, 3.55 e 3.56 apresenta-se o comportamento da norma do erro do gradiente com o refinamento das cinco diferentes malhas apresentadas.

Nos gráficos das figuras 3.53 e 3.54 nota-se que os métodos com abordagem *cell-based* somente não conseguem tratar as malhas com distorção aleatória. Nos demais tipos de malhas percebe-se que há a convergência sendo que os resultados encontrados na figura 3.54 apresentam-se mais aceitáveis, isto é, maiores ordens de convergência e menores valores da norma do erro.

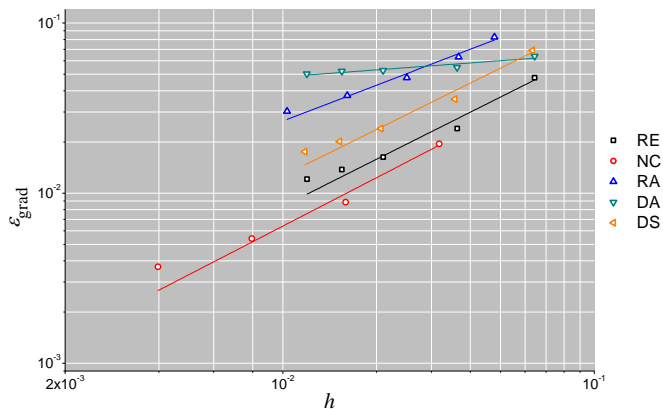


Figura 3.53 – Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método GGCBW_1S.

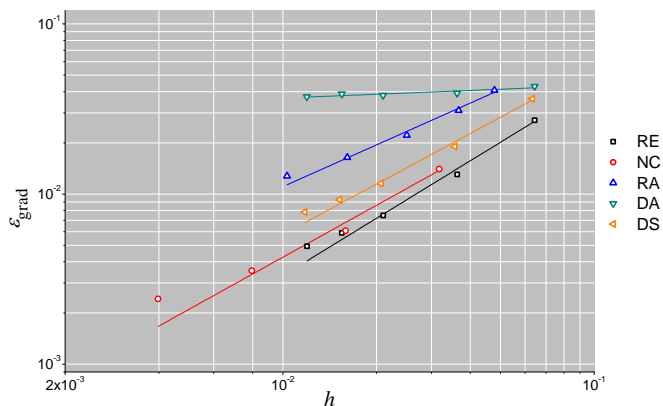


Figura 3.54 – Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método GGCBW_2S.

Utilizando GGVBPL percebe-se que a dificuldade encontrada nos métodos com abordagem *cell-based* para tratar a malha DA não existe. Logo, o referido método é altamente recomendado já que pode ser utilizado em qualquer tipo de malha testada, apresentando altas ordens de convergência.

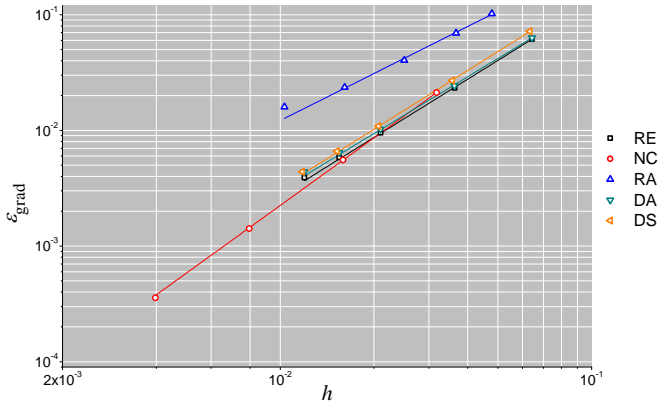


Figura 3.55 – Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método GGVBP.

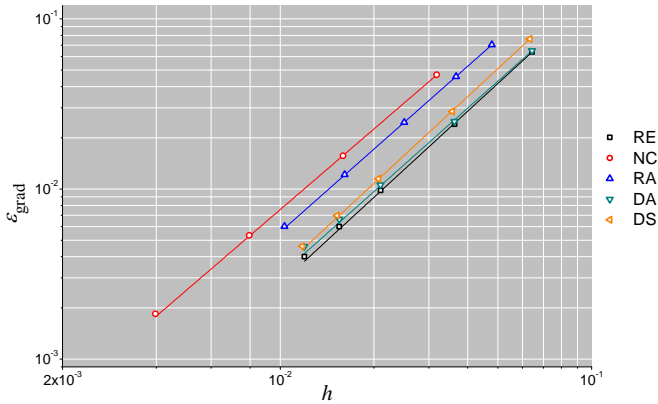


Figura 3.56 – Convergência do gradiente de pressão nas diferentes malhas apresentadas, considerando o método LSSID.

Na figura 3.56 nota-se a insensibilidade do método LSSID com relação à distorção das malhas. Basta verificar que para todas as malhas as inclinações são praticamente as mesmas, variando-se somente o nível da norma do erro.

Deve-se examinar agora se os métodos que apresentam os melhores resultados de gradiente não consomem um tempo demasiadamente ele-

vado para desempenhar tal função. É importante então discutir o tempo computacional necessário para executar a reconstrução do gradiente segundo cada método.

3.3 Comparação dos tempos de computação

A fim de caracterizar o tempo computacional foram empregados dois novos conceitos a serem discutidos nesta seção: os tempos de inicialização e de reconstrução. Gráficos de tempo, seja ele o de inicialização ou de reconstrução, versus o comprimento característico da malha foram plotados também em escala logarítmica a fim de se avaliar o comportamento desses tempos com o refino da malha.

O tempo computacional foi medido utilizando a biblioteca *Timer* da *Boost* [8]. Através desta biblioteca é possível determinar qual o tempo necessário para se executar um determinado código na linguagem C++, utilizada neste trabalho.

O tempo envolvido pode ser ajustado a uma função potência conforme

$$t = \alpha h^{\beta} \quad (3.12)$$

assim como na equação (3.11) quando a norma do erro estava sendo analisada. Espera-se que este tempo seja maior à medida que a malha é refinada, pois através desta ação o número de volumes de controle aumenta e por consequência a quantidade de operações a serem executadas cresce. Sendo assim, como o comprimento característico h é um valor menor que a unidade, a ordem β deve ser um valor negativo esperando-se que seu módulo seja aproximadamente 2. A explicação para essa expectativa é dada a seguir.

Lembrando que o objetivo é a obtenção do gradiente de pressão através de um campo de pressão conhecido, ao considerar que o domínio unitário é discretizado por exemplo com as malhas regulares, espera-se que o aumento do número de volumes de controle seja diretamente proporcional ao aumento do tempo computacional. Ou seja, aumentando-se o número de variáveis aumenta-se linearmente o tempo computacional associado.

Idealmente, o tempo de computação deveria crescer de forma proporcional ao número de valores de gradiente calculados, que, neste caso, é igual ao número de volumes de controle de uma dada malha. Se a malha

fosse uma malha cartesiana uniforme e o domínio quadrado unitário, o comprimento característico dos volumes da malha seria $h = N_c^{-1/2}$, onde N_c é o número de volumes da malha. Para uma malha poligonal arbitrária, poder-se-ia esperar que fosse válida uma relação da forma

$$h \approx N_c^{-1/2} \quad (3.13)$$

ou, escrita de outra forma,

$$N_c \approx h^{-2} \quad (3.14)$$

Portanto, uma relação linear entre o tempo computacional e o número de volumes de controle daria lugar a uma relação entre o tempo computacional e o comprimento característico da forma

$$t \approx h^{-2} \quad (3.15)$$

Antes de apresentar os resultados obtidos é necessário definir os tempos de inicialização e de reconstrução. O de inicialização é aquele gasto para o cálculo de parâmetros que não se alteram durante uma simulação. Os valores desses parâmetros são fixos já que dependem de fatores geométricos da malha, e, portanto, ao se atualizar o campo de pressão elas não necessitam ser calculadas novamente. Exemplos desses parâmetros são o fator de ponderação β_f encontrado na equação (2.15) quando se quer utilizar o método GGCBW_1S, e o vetor $\mathbf{L}_{p,f}$ encontrado na equação (2.17) quando se quer utilizar os métodos GGCBW_2S ou GGCBW_2S.

O tempo de reconstrução é aquele gasto nas operações de reconstrução do gradiente utilizando os parâmetros computados na inicialização e os valores atuais do campo de pressão. Por exemplo, considerando o método GGVBPL, o tempo de reconstrução leva em conta o cálculo do valor da pressão nos vértices, nas faces e também a substituição desses valores na fórmula de Green-Gauss para se determinar o gradiente de pressão em cada volume da malha.

Os gráficos apresentados a seguir correspondem a testes de reconstrução do gradiente em malhas regulares, considerando a pressão variando de acordo com a função oscilatória. Comparando o tempo computacional dos métodos que se destacaram nos testes de convergência com os demais métodos, o propósito é verificar se os melhores resultados encontrados naqueles estão associados a tempos computacionais elevados. Procura-se, assim, avaliar quais métodos apresentam uma boa relação

custo/benefício.

Nas figuras 3.57 e 3.58 encontram-se os gráficos de tempo de inicialização e de reconstrução, considerando os métodos com abordagem *cell-based*. Da forma como está implementado o código computacional, a diferença entre esses métodos com relação aos procedimentos com um passo e dois passos está somente no tempo de reconstrução, por isso o tempo de inicialização é o mesmo entre eles. Sendo assim, GGCBW_1S e GGCBW_2S apresentam o mesmo tempo de inicialização, mesmo o primeiro sendo mais simplificado, assim como GGCBA_1S e GGCBA_2S. Este é o motivo pelo qual no gráfico referente ao tempo de inicialização apenas dois métodos são mostrados.

Na figura 3.57 percebe-se que o método GGCBW_1S, e por consequência GGCBW_2S, exibe um valor de tempo de inicialização maior que GGCBA_1S. Porém, deve-se lembrar que os parâmetros considerados no tempo de inicialização são calculados somente uma vez durante a simulação, assim, a pequena diferença de valores entre os pontos envolvidos justifica o uso dos métodos com média ponderada pela distância.

Nota-se na figura 3.58 que o método GGCBW_1S além de apresentar bons resultados com relação à aproximação do gradiente apresenta também um tempo de reconstrução cujos valores são próximos ao método que apresenta o menor tempo, o GGCBA_1S. Este último apesar de apresentar o mais baixo tempo de reconstrução, não apresentou resultados aceitáveis com relação à aproximação do gradiente, não tendo assim um bom custo/benefício.

O mais alto tempo obtido em GGCBW_2S ainda o torna um dos métodos a ser destacado pois além de apresentar um bom desempenho com relação à aproximação do gradiente, é visível que os valores de tempo de reconstrução a ele associado são baixos, basta verificar a baixa ordem de grandeza desses valores na figura 3.58. Logo, somente um valor muito alto de número de iterações evidenciaria uma diferença significativa de tempo computacional ao se comparar GGCBW_2S e GGCBA_2S, por exemplo.

Os gráficos das figuras 3.59 e 3.60 mostram o comportamento dos tempos de inicialização e reconstrução quando se utilizam os métodos com abordagem *vertex-based*. Os parâmetros fixos nesses métodos são os fatores de ponderação associados a cada vértice da malha analisada.

Ao analisar a figura 3.59 fica claro que a determinação dos fatores de ponderação associados a cada vértice interno das malhas tem um maior

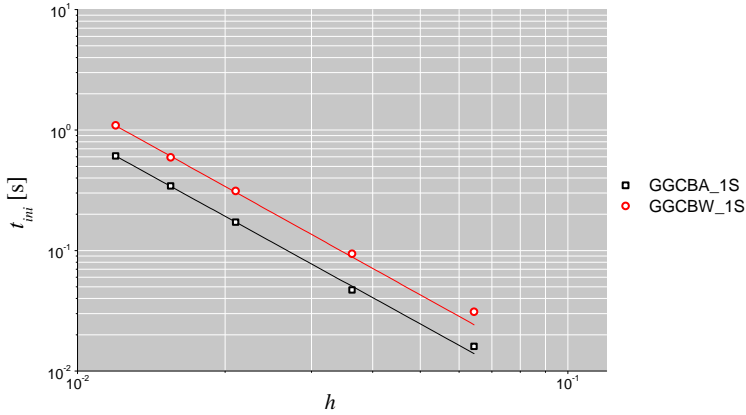


Figura 3.57 – Tempo de inicialização considerando os métodos com abordagem *cell-based*.

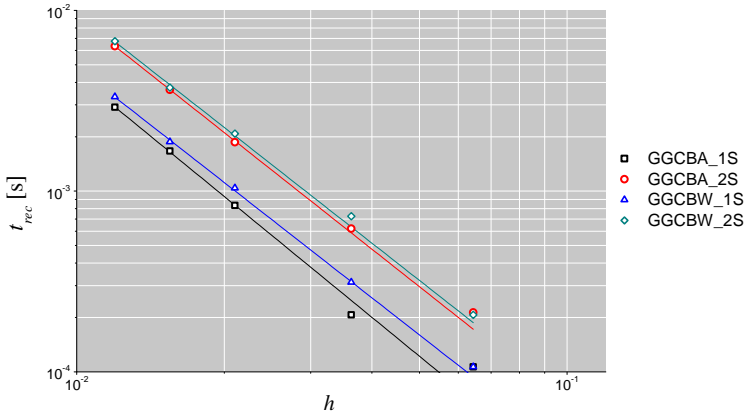


Figura 3.58 – Tempo de reconstrução considerando os métodos com abordagem *cell-based*.

custo computacional no método GGVBPL. Basta verificar as equações (2.21) e (2.27), referentes a GGVBID e GGVBPL respectivamente, para confirmar que na segunda equação esses fatores necessitam de mais parâmetros geométricos para serem determinados.

Com relação ao tempo de reconstrução, algum erro na sua medição é verificado, já que os tempos associados aos dois métodos deveriam ser

iguais. Isso pelo fato do procedimento ser o mesmo em ambos os métodos depois de determinados os fatores de ponderação, isto é, calcula-se a pressão nos vértices, nas faces correspondentes e por fim o gradiente de pressão associado.

Pode-se concluir a partir dos testes com abordagem *vertex-based* que a utilização de GGVBPL é a mais recomendável pois somente o tempo de inicialização apresenta um valor maior com relação ao método GGVBID. Além da diferença entre o tempo de inicialização dos dois métodos ser um valor aceitável, deve-se ressaltar mais uma vez que os parâmetros fixos a ele associados são determinados somente uma vez durante toda uma simulação.

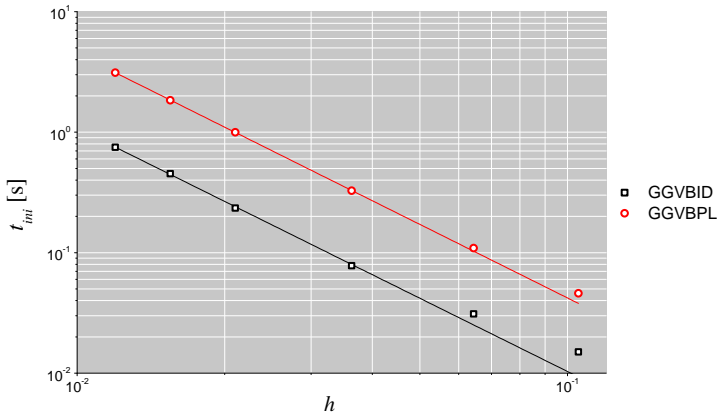


Figura 3.59 – Tempo de inicialização considerando os métodos com abordagem *vertex-based*.

Nas figuras 3.61 e 3.62 encontram-se os valores do tempo de inicialização e de reconstrução considerando os métodos que utilizam mínimos quadrados. Percebe-se em ambas as figuras que as linhas de tendência se sobrepõem, logo não se observa uma variação no tempo computacional entre tais métodos.

Uma observação importante com relação ao tempo de inicialização é que no código computacional a matriz de pesos \mathbb{W} , única diferença entre os três métodos expostos, é calculada considerando o expoente c como um parâmetro de entrada. Mesmo empregando o método LSUN deve-se determinar cada valor das componentes da referida matriz, basta considerar

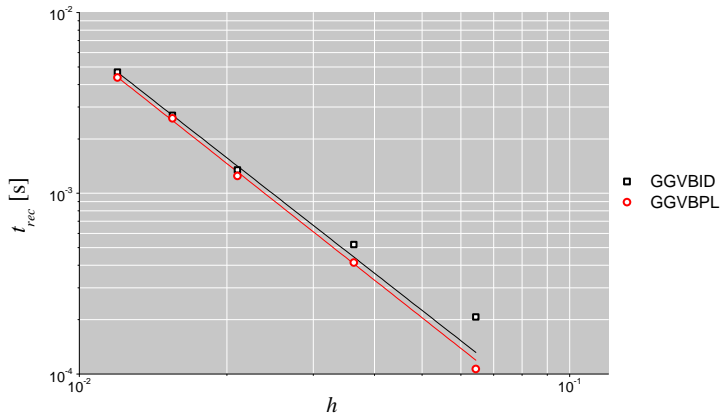


Figura 3.60 – Tempo de reconstrução considerando os métodos com abordagem *vertex-based*.

c com o valor 0 assim como é explicado na seção do método de reconstrução correspondente. É por esse motivo que o tempo de inicialização é semelhante para todos os métodos de reconstrução que utilizam mínimos quadrados.

O tempo de reconstrução também é equivalente entre os referidos métodos já que, uma vez determinados os parâmetros fixos, o procedimento para determinação do gradiente de pressão ao longo da malha não varia.

Observando os gráficos desta seção, percebe-se que a ordem de grandeza dos tempos de inicialização é maior que a dos tempos de reconstrução. O expoente β , definido na equação (3.12), é de aproximadamente -2, conforme esperado.

Dentre os métodos analisados, aqueles que utilizam mínimos quadrados apresentam os maiores tempos de inicialização e reconstrução. Isto ocorre pois, diferentemente dos demais, tais métodos necessitam resolver um sistema de equações para cada volume de controle da malha em análise.

Sendo assim, os métodos que se sobressaíram com relação à aproximação do gradiente, GGCBW_1S, GGCBW_2S, GGVBPL e LSSID, apresentaram uma boa relação custo/benefício. Logo, estes serão utilizados na aproximação dos fluxos em uma formulação numérica para malhas poligonais, conforme será discutido no próximo capítulo.

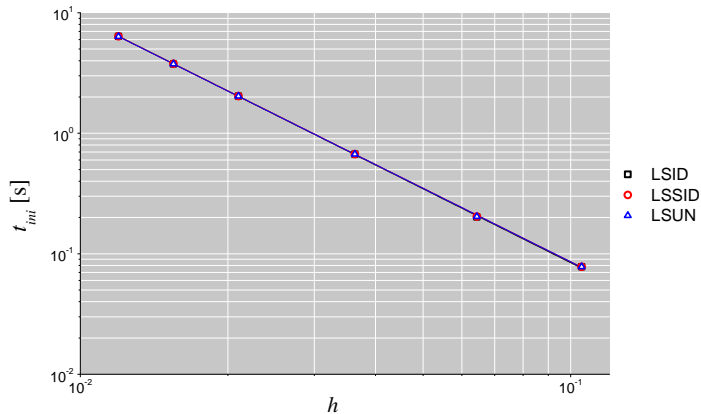


Figura 3.61 – Tempo de inicialização considerando os métodos que utilizam mínimos quadrados.

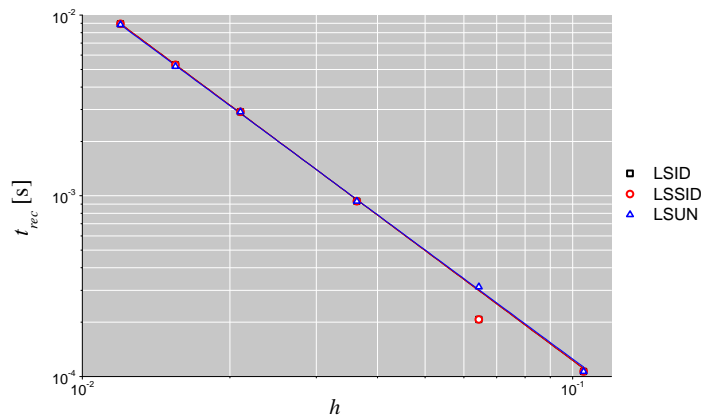


Figura 3.62 – Tempo de reconstrução considerando os métodos que utilizam mínimos quadrados.

APLICAÇÃO À DISCRETIZAÇÃO DE UM MODELO DE ESCOAMENTO MONOFÁSICO

4.1 Introdução

Ao se fazer a discretização da equação do modelo bidimensional monofásico em meios porosos utilizando o método dos volumes finitos, surge a necessidade de aproximar os fluxos através das faces dos volumes de controle das malhas poligonais. Esta aproximação é realizada segundo um esquema numérico que tem como princípio determinar o fluxo mediante uma expressão composta por dois termos, um tratado implicitamente e o outro explicitamente. Para este último são necessários os valores do gradiente de pressão em cada um dos volumes da malha. É nesse ponto que se fazem importantes os métodos de reconstrução apresentados no capítulo 2.

No presente capítulo é então apresentada a equação da conservação da massa discretizada considerando volumes de controle internos e de fronteira, sendo a forma de aproximar os fluxos nas faces também evidenciada.

4.2 Discretização da equação da conservação de massa

Conforme já mencionado, o método utilizado para discretizar a equação de conservação é o método dos volumes finitos. No caso do presente trabalho, a equação discretizada é obtida integrando-se sobre os volumes de controle a equação (1.6), escrita na forma conservativa ¹.

Realizando a referida integração para o caso monofásico em regime permanente em um volume de controle ΔV , obtém-se

$$\int_{\Delta V} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dV = \int_{\Delta V} q dV \quad (4.1)$$

Aplicando o teorema da divergência na integral volumétrica no lado esquerdo da equação anterior, chega-se a

$$\int_{\Delta S} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\Delta V} q dV \quad (4.2)$$

O primeiro termo da equação (4.2) representa o fluxo de massa líquido através da superfície do volume de controle, já o termo do lado direito representa uma fonte ou sumidouro de massa no seu interior.

Neste trabalho, os volumes de controle analisados são poligonais. Portanto, pode-se utilizar a propriedade da aditividade das integrais a fim de expressar a integral de superfície da equação (4.2) como um somatório de integrais em cada face de um volume de controle qualquer p [17]. Assim, a equação anterior pode ser escrita como

$$\sum_{f \in p} \int_{\Delta S_f} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = Q_p \quad (4.3)$$

sendo o termo da integral o fluxo de massa através de uma face do volume p e o termo fonte Q_p representa a integral no lado direito da equação (4.2).

Aproximando a integral de superfície da equação anterior pela regra do ponto médio [17], tal equação pode ser assim apresentada

¹Também denominada de forma divergente é aquela em que na equação diferencial os fluxos estão dentro do sinal da derivada [25].

$$\sum_{f \in p} (\rho \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{S})_f = Q_p \quad (4.4)$$

A equação (4.4) é resultado da discretização espacial da equação da conservação da massa. O termo da esquerda representa o somatório dos fluxos de massa através de todas as faces do volume de controle em questão. Substituindo a velocidade de Darcy, equação (1.2), na equação (4.4) obtém-se

$$\sum_{f \in p} \left(-\frac{\rho}{\mu} \mathbb{K} \nabla P \cdot \Delta \mathbf{S} \right)_f = Q_p \quad (4.5)$$

O fluxo de massa através de uma face do volume de controle $\left(-\frac{\rho}{\mu} \mathbb{K} \nabla P \cdot \Delta \mathbf{S} \right)_f$ está deduzido na próxima seção e será denominado por q_f . Recomenda-se a leitura da seção 4.3 para o correto entendimento deste desenvolvimento.

Adotando a nomenclatura apresentada no parágrafo anterior, a equação (4.5) pode ser escrita de uma forma simplificada por

$$\sum_{f \in p} q_f = Q_p \quad (4.6)$$

sendo a expressão do fluxo dada por

$$q_f = \frac{P_p - P_n}{\tau_p - \tau_n} - \frac{\tau_p \theta_p^* - \tau_n \theta_n^*}{\tau_p - \tau_n} \quad (4.7)$$

com P_p e P_n representando os valores de pressão associados aos volumes de controle adjacentes à face f , τ_p e τ_n sendo parâmetros que envolvem a geometria dos volumes envolvidos e propriedades do fluido e do meio poroso. Os demais parâmetros da equação (4.7), θ_p^* e θ_n^* , dependem, além de propriedades e geometria, do gradiente de pressão calculado segundo os métodos de reconstrução do gradiente apresentados no capítulo 2.

Considerando um volume de controle p , a equação discretizada da conservação da massa (4.6) pode ser organizada de tal maneira a ser escrita na forma usual do método dos volumes finitos

$$A_p P_p = \sum_{k=1}^{N_{oc}} A_{n_k} P_{n_k} + b_p \quad (4.8)$$

onde $k = 1, 2, \dots, N_{vc}$ sendo N_{vc} o número de volumes de controle adjacentes a p . O termo b_p é o termo independente da equação composto por valores já conhecidos, A_p é o coeficiente central associado a p (onde se deseja obter a pressão) e A_{n_k} é o coeficiente relacionado a cada um dos volumes de controle adjacentes a p . A figura 4.1 ilustra os volumes de controle que participam diretamente da equação discretizada (4.8).

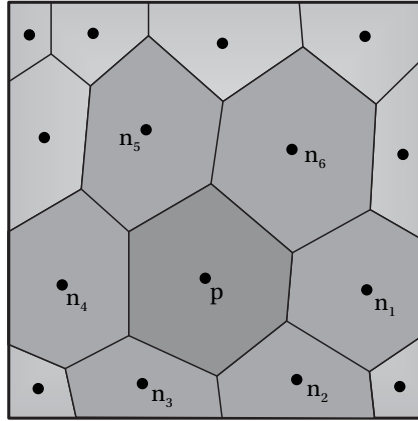


Figura 4.1 – Volumes de controle que participam da equação aproximada associada a p .

Para um volume de controle que apresenta um termo fonte, os coeficientes e o termo independente da equação (4.8) são a seguir apresentados

$$A_{n_k} = \frac{1}{\tau_p - \tau_{n_k}}$$

$$A_p = \sum_{k=1}^{N_{vc}} A_{n_k} \quad (4.9)$$

$$b_p = Q_p + \sum_{k=1}^{N_{vc}} \frac{(\tau_p \theta_p^* - \tau_{n_k} \theta_{n_k}^*)}{\tau_p - \tau_{n_k}}$$

sendo os somatórios realizados considerando-se todos os volumes vizinhos a p .

Para um volume de controle que não apresenta fonte ou sumidouro de massa, a equação discretizada da conservação da massa tem a mesma

forma da equação (4.8), porém, $Q_p = 0$ ao se determinar o termo independente.

A equação (4.8) é aplicada para os volumes de controle internos da malha, isto é, aqueles que não fazem parte das fronteiras do domínio físico. A equação para um volume de controle adjacente a uma ou mais fronteiras deve ser alterada para que as informações das condições de contorno sejam sentidas no interior do domínio. Na seção 4.4 os volumes localizados nas fronteiras são analisados.

4.3 Aproximação dos fluxos

O esquema numérico para aproximação dos fluxos aqui apresentado é baseado na abordagem apresentada em [30], a qual foi proposta originalmente para a discretização das equações de Navier-Stokes.

Em tal referência o fluxo através de uma face f é aproximado através de uma expressão composta por dois termos. O primeiro deles depende de fatores geométricos e dos valores da variável nos volumes de controle associados à referida face. Este termo é tratado de forma implícita, isto é, ele contribui para os coeficientes da equação discretizada.

O segundo termo é usualmente chamado de difusão cruzada já que representa a componente transversal do fluxo. Esse termo se anula nos casos em que o meio é isotrópico e a linha que une os centroides dos volumes de controle coincide com a direção do vetor área da face comum a eles, ou seja, quando a malha é localmente ortogonal.

Em [30] sugere-se tratar o termo da difusão cruzada de forma explícita, utilizando para isto valores da variável de uma iteração anterior. Tal procedimento torna a referida parcela do fluxo um integrante do termo independente da equação da conservação analisada, pois seu valor será conhecido. A implementação é facilitada ao empregar essa abordagem, porém, ao mesmo tempo um esquema iterativo é necessário para determinar a solução numérica da equação de conservação [27]. A seguir é descrito o esquema numérico para aproximação dos fluxos adotado neste trabalho. Vale ressaltar que, apesar do meio ser considerado homogêneo nos problemas aqui analisados, a referida aproximação é descrita para um caso mais genérico, em que a permeabilidade pode variar de um volume de controle para outro.

O fluxo através de uma face é analisado considerando-se primeiramente um dos volumes de controle que compartilham essa face, conforme

mostra a figura 4.2. Utilizando a propriedade comutativa do produto escalar tem-se na forma matricial para esse fluxo

$$\frac{\rho}{\mu} (\mathbb{K} \nabla P)_p \cdot \Delta \mathbf{S}_f = \frac{\rho}{\mu} \Delta \mathbf{S}_f \cdot (\mathbb{K} \nabla P)_p =$$

$$\frac{\rho}{\mu} \begin{pmatrix} \Delta S_x & \Delta S_y \end{pmatrix}_f \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{xy} & K_{yy} \end{pmatrix}_p \begin{pmatrix} \partial_x P \\ \partial_y P \end{pmatrix}_p \quad (4.10)$$

Nesta expressão, o tensor permeabilidade e o gradiente de pressão estão associados ao volume de controle considerado. As componentes cartesianas do vetor área de face são ΔS_x e ΔS_y , enquanto que $\partial_x P$ e $\partial_y P$ são as componentes do gradiente de pressão.

A equação (4.10) ainda não é aplicável à discretização da equação de conservação de massa, pois não envolve valores discretos da pressão. Com o intuito de introduzir esses valores na expressão do fluxo, irá se considerar uma transformação local de coordenadas. Os eixos cartesianos (x, y) são transformados em (ξ, η) , sendo ξ aquele que segue a direção da linha que une o centroide do volume de controle ao centroide da face e cujo sentido (de p para f) está demonstrado na figura 4.2. Por conveniência, escolheu-se que o outro eixo, η , coincidisse com o eixo y . O critério para a transformação dos eixos depende da configuração local, e será descrito mais adiante.

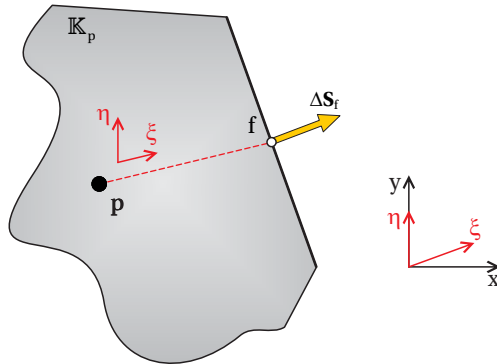


Figura 4.2 – Representação de um volume de controle e disposição do novo sistema coordenado (ξ, η) .

Escrevendo o gradiente de pressão de acordo com o novo sistema

coordenado, a equação (4.10) torna-se

$$\frac{\rho}{\mu} (\mathbf{K} \nabla P)_p \cdot \Delta \mathbf{S}_f = \frac{\rho}{\mu} \begin{pmatrix} \Delta S_x & \Delta S_y \end{pmatrix}_f \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{xy} & K_{yy} \end{pmatrix}_p \begin{pmatrix} \partial_x \xi & \partial_x \eta \\ \partial_y \xi & \partial_y \eta \end{pmatrix}_p \begin{pmatrix} \partial_\xi P \\ \partial_\eta P \end{pmatrix}_p \quad (4.11)$$

A terceira matriz do lado direito da equação (4.11) é a matriz jacobiana da transformação de coordenadas, que faz a conexão entre os sistemas coordenados. A fim de se determinar as métricas que compõem essa matriz, a seguinte relação encontrada em [25] é utilizada

$$\begin{pmatrix} \partial_x \xi & \partial_y \xi \\ \partial_x \eta & \partial_y \eta \end{pmatrix}_p = \begin{pmatrix} \partial_\xi x & \partial_\eta x \\ \partial_\xi y & \partial_\eta y \end{pmatrix}_p^{-1} \quad (4.12)$$

A matriz a ser invertida é composta pelas métricas da transformação inversa. Essas métricas são determinadas conforme descrito a seguir.

Seja \mathbf{e}_ξ o vetor obtido unindo os centroides do volume de controle p e da face f. Esse vetor pode ser decomposto segundo os eixos cartesianos, conforme mostrado na figura 4.3.

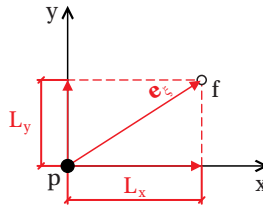


Figura 4.3 – Decomposição do vetor \mathbf{e}_ξ no sistema cartesiano.

Sendo o eixo coordenado ξ colinear ao vetor \mathbf{e}_ξ e a distância entre os centroides p e f um valor igual a $\Delta \xi$ (o módulo do referido vetor), tem-se utilizando o conceito de derivada a situação ilustrada na figura 4.4.

Analizando as duas últimas figuras, obtém-se por comparação duas

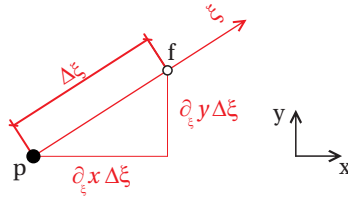


Figura 4.4 – Eixo coordenado ξ e centroides p e f.

das métricas da transformação inversa

$$(\partial_{\xi} x)_p = \left(\frac{L_x}{\Delta \xi} \right)_p \quad (4.13)$$

$$(\partial_{\xi} y)_p = \left(\frac{L_y}{\Delta \xi} \right)_p \quad (4.14)$$

Para a situação ilustrada na figura 4.2, os eixos coordenados ξ e η foram escolhidos de tal forma que η coincidisse com y . Logo, as duas métricas restantes são

$$(\partial_{\eta} x)_p = 0 \quad (4.15)$$

$$(\partial_{\eta} y)_p = 1 \quad (4.16)$$

Estando assim determinadas todas as métricas da transformação inversa, basta realizar a inversão da matriz apresentada na equação (4.12) para finalmente obter a matriz jacobiana necessária na equação (4.11)

$$\begin{pmatrix} \partial_x \xi & \partial_x \eta \\ \partial_y \xi & \partial_y \eta \end{pmatrix}_p = \begin{pmatrix} \frac{\Delta \xi}{L_x} & \frac{-L_y}{L_x} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_p \quad (4.17)$$

Com o intuito de simplificar a equação do fluxo será definido o vetor

$$\begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_y \end{pmatrix}_p = \begin{pmatrix} \Delta S_x & \Delta S_y \end{pmatrix}_f \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{xy} & K_{yy} \end{pmatrix}_p \quad (4.18)$$

com o qual a equação (4.11) pode ser rescrita, após realizar os produtos indicados, como

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{\mu}(\mathbb{K} \nabla P)_p \cdot \Delta \mathbf{S}_f = & \frac{\rho}{\mu} \left(\sigma_x \partial_x \xi + \sigma_y \partial_y \xi \right)_p (\partial_\xi P)_p + \\ & \frac{\rho}{\mu} \left(\sigma_x \partial_x \eta + \sigma_y \partial_y \eta \right)_p (\partial_\eta P)_p \end{aligned} \quad (4.19)$$

Ainda é necessário definir as derivadas parciais da pressão para que o fluxo esteja completamente determinado. A derivada $(\partial_\xi P)_p$ pode ser aproximada aplicando diferenças finitas por $(\partial_\xi P)_p \approx (P_f - P_p)/\Delta \xi_p$, onde P_f e P_p são as pressões associadas aos centroides da face e do volume p , respectivamente. Como no caso considerado o eixo coordenado η é concidente com y , a outra derivada da equação (4.19) pode ser escrita simplesmente como $(\partial_\eta P)_p = (\partial_y P)_p$.

Substituindo as derivadas parciais correspondentes às métricas da transformação e as derivadas da pressão, a equação (4.19) toma a seguinte forma aproximada

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{\mu}(\mathbb{K} \nabla P)_p \cdot \Delta \mathbf{S}_f \approx & \frac{\rho}{\mu} \left(\sigma_x \frac{\Delta \xi}{L_x} \right)_p \frac{P_f - P_p}{\Delta \xi_p} + \\ & \frac{\rho}{\mu} \left(-\sigma_x \frac{L_y}{L_x} + \sigma_y \right)_p (\partial_y P)_p \end{aligned} \quad (4.20)$$

Com o intuito de simplificar a escrita da equação anterior, os seguintes parâmetros associados à face f e ao volume de controle p são definidos

$$\begin{aligned} \tau_p = & \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{L_x}{\sigma_x} \right)_p \\ \theta_p^* = & \frac{\rho}{\mu} \left(-\sigma_x \frac{L_y}{L_x} + \sigma_y \right)_p (\partial_y P)_p^* \end{aligned} \quad (4.21)$$

O asterisco aparente na equação anterior indica que a derivada parcial $(\partial_y P)_p$ é determinada de forma explícita, considerando os valores de pressão conhecidos do nível iterativo anterior ao analisado.

Definidos os novos parâmetros na equação (4.21), a expressão para o fluxo atravessando a face f pode ser escrita por

$$q_f = -\frac{\rho}{\mu}(\mathbb{K} \nabla P)_p \cdot \Delta \mathbf{S}_f = -\frac{P_f - P_p}{\tau_p} - \theta_p^* \quad (4.22)$$

Deve-se ressaltar que recém na equação (4.22) foi incluído o sinal negativo proveniente da definição da lei de Darcy. As equações apresentadas até o momento estiveram relacionadas a um dos volumes de controle adjacentes a f . Expressões equivalentes podem ser determinadas considerando o outro volume. Assim, a expressão equivalente à equação (4.22) para o volume de controle n é dada por

$$q_f = -\frac{\rho}{\mu}(\mathbb{K} \nabla P)_n \cdot \Delta \mathbf{S}_f = -\frac{P_f - P_n}{\tau_n} - \theta_n^* \quad (4.23)$$

onde os parâmetros τ_n e θ_n^* são expressões análogas às da equação (4.21), envolvendo neste momento os parâmetros geométricos e o tensor permeabilidade associados ao volume n . De acordo com a figura 4.5, para cada volume de controle deverá ser definido um eixo auxiliar ξ diferente, com o sentido positivo apontando na direção da face [27].

As derivadas parciais, componentes dos parâmetros θ_p^* e θ_n^* , são parcelas do gradiente de pressão que podem ser determinadas por algum dos métodos de reconstrução explícita do gradiente vistos no capítulo 2. É portanto nestes parâmetros que surge a conexão entre a discretização da equação de conservação de massa e os referidos métodos de reconstrução do gradiente.

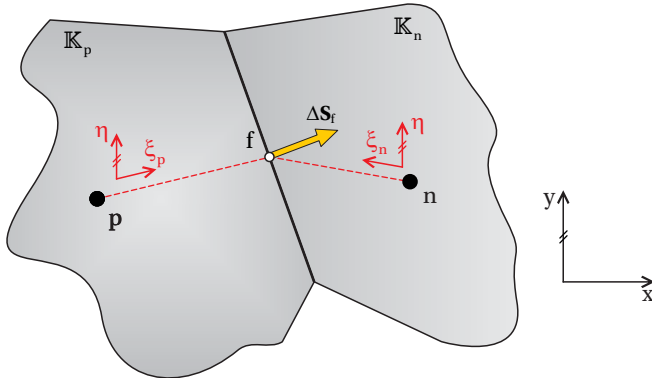


Figura 4.5 – Entidades envolvidas na determinação do fluxo em uma face interna.

Partindo do princípio de que o fluxo que deixa o volume de controle p através da face f é o mesmo fluxo que ingressa no volume vizinho n , as

equações (4.22) e (4.23) podem ser manipuladas algebricamente a fim de eliminar a pressão P_f . A expressão final do fluxo, que envolve apenas os valores de pressão nos centroides dos volumes de controle adjacentes a f , é a seguinte

$$q_f = \frac{P_p - P_n}{\tau_p - \tau_n} - \frac{\tau_p \theta_p^* - \tau_n \theta_n^*}{\tau_p - \tau_n} \quad (4.24)$$

Os dois termos na equação (4.24) podem ser interpretados da mesma forma que em [30]. O primeiro pode ser entendido como uma difusão primária e é tratado implicitamente já que durante o ciclo iterativo, a ser explicado no próximo capítulo, considera as variáveis do nível iterativo corrente, contribuindo assim com os coeficientes da equação discretizada.

O segundo termo é referente à difusão cruzada. Este termo torna-se importante nos casos em que a face não é ortogonal à linha que une os centroides dos volumes vizinhos ou a permeabilidade é altamente anisotrópica. A fim de manter um estêncil compacto para a equação discretizada de conservação de massa, o segundo termo é tratado explicitamente, ou seja, ele é calculado com os valores do gradiente calculados utilizando o campo de pressão do nível iterativo anterior. Logo, na equação discretizada da conservação da massa, o referido termo fará parte do termo independente.

A aproximação do fluxo considerando apenas dois pontos, sem qualquer termo explícito de correção como na equação (4.24), é uma prática comum na simulação de reservatórios, pois dá origem a sistemas lineares de equações com matrizes altamente esparsas e fáceis de resolver. Dependendo do tipo de problema, geometria da malha e anisotropia do meio, essa abordagem pode originar erros significativos nas soluções. Somente para o caso particular de um meio isotrópico e malha ortogonal, como a cartesiana por exemplo, o fluxo através das faces dos volumes de controle é calculado corretamente utilizando-se apenas dois valores de pressão. Isso ocorre nesse caso porque o fluxo depende somente da derivada da pressão em relação a um eixo coordenado [37]. Utilizando as malhas de Voronoi [25] em problemas isotrópicos consegue-se também calcular os fluxos exatamente empregando-se apenas dois pontos de pressão. Isto ocorre porque a linha que une os centroides dos volumes de controle é ortogonal à face que os separa.

Um ponto importante a ser comentado é que os parâmetros apresentados na equação (4.21) foram obtidos considerando a transformação local

de coordenadas apresentada na figura 4.2, em que o eixo η coincide com y . Esta transformação seria apropriada, por exemplo, para a configuração geométrica apresentada na figura 4.6 (a) em que os valores absolutos das projeções horizontais do vetor $\mathbf{r}_{p,n}$ e do vetor área face são maiores que os valores absolutos das suas projeções verticais.

Em uma outra situação, por exemplo a do caso (b) da figura 4.6, o contrário é verificado. A transformação de coordenadas mais conveniente para esse caso é a mostrada na figura 4.7, sendo agora o eixo ξ coincidente com o eixo x . Para esta nova situação, os parâmetros envolvidos na equação (4.22) passam a ser dados por

$$\tau_p = \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{L_y}{\sigma_y} \right)_p \quad (4.25)$$

$$\theta_p^* = \frac{\rho}{\mu} \left(\sigma_x - \sigma_y \frac{L_x}{L_y} \right)_p (\partial_x P)_p^*$$

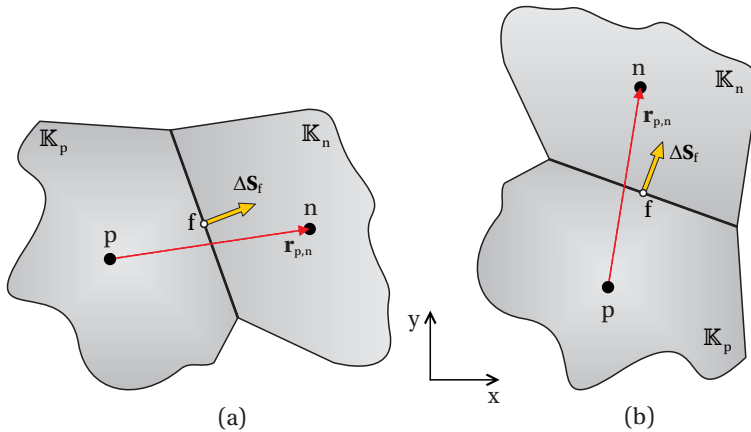


Figura 4.6 – Duas situações possíveis para transformação dos sistemas coordenados.

Na implementação computacional do método descrito, além de verificar qual projeção do vetor $\mathbf{r}_{p,n}$ é maior para selecionar a transformação de coordenadas mais adequada, uma verificação adicional é feita. Nela, as projeções do vetor área de face são analisadas. A projeção deste vetor sobre

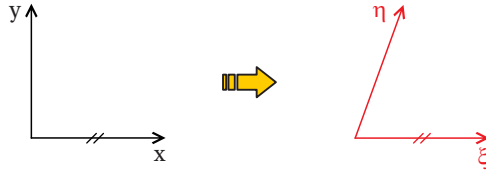


Figura 4.7 – Transformação dos sistemas coordenados para o caso em que as projeções verticais dos vetores $\mathbf{r}_{p,n}$ e da área face são maiores que as projeções horizontais.

o eixo escolhido na primeira etapa (aquele sobre o qual a projeção de $\mathbf{r}_{p,n}$ é maior) não deve ter um valor muito menor que a projeção sobre o outro eixo e também não pode ser um valor nulo. Caso alguma dessas condições se verifique, escolhe-se a outra opção de transformação de coordenadas.

Essa segunda etapa de verificação é importante para que problemas na determinação do parâmetro τ não venham a surgir e também para dar maior importância à parcela implícita na equação (4.24). No próximo capítulo é verificado que quando a parcela explícita nessa equação é muito maior à parcela implícita, a convergência do processo iterativo de solução pode ser comprometida.

Deve ficar claro que a equação final do fluxo (4.24) é utilizada para qualquer tipo de transformação de coordenadas. O que realmente diferencia uma transformação da outra em tal equação é a determinação dos parâmetros associados.

4.4 Volumes de controle de fronteira

O objetivo desta seção é apresentar a equação da conservação da massa na forma discretizada considerando um volume de controle localizado na fronteira do domínio. Na apresentação feita a seguir considera-se que nas fronteiras é imposta uma condição de Dirichlet, ou seja, a variação da pressão em todas as fronteiras é conhecida.

O fluxo através de uma face coincidente com uma fronteira pode ser aproximado com a equação (4.22), a qual pode ser reescrita como

$$q_{f_1} = \frac{P_p - P_{f_1}}{\tau_p} - \theta_p^* \quad (4.26)$$

sendo f_1 a face localizada na referida posição, conforme ilustrado na figura

4.8. A transformação de coordenadas realizada deve seguir o mesmo princípio apresentado na seção anterior. Contudo, agora o vetor $\mathbf{r}_{p,f}$ é o vetor cujas projeções devem ser analisadas na primeira etapa.

Na equação (4.26), o valor de P_{f_1} é conhecido, pois f_1 se encontra sobre uma fronteira em que a variação da pressão é conhecida. Portanto, ao substituir a equação (4.26) na equação de balanço para o volume de controle correspondente, a parcela associada a P_{f_1} poderá ser adicionada ao termo independente da equação. Assim, a equação discretizada para um volume de controle p adjacente à fronteira é

$$A_p P_p = \sum_{k=1}^{N_{vc}} A_{n_k} P_{n_k} + b'_p \quad (4.27)$$

em que os coeficientes e o termo independente são dados por

$$\begin{aligned} A_{n_k} &= \frac{1}{\tau_p - \tau_{n_k}} \\ A_{f_1} &= \frac{1}{\tau_p} \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} A_p &= \sum_{k=1}^{N_{vc}} A_{n_k} + A_{f_1} \\ b'_p &= Q_p + \sum_{k=1}^{N_{vc}} \frac{(\tau_p \theta_p^* - \tau_{n_k} \theta_{n_k}^*)}{\tau_p - \tau_{n_k}} + A_{f_1} P_{f_1} + \theta_p^* \end{aligned}$$

Os somatórios envolvem todos os volumes de controle adjacentes a p . Percebe-se que a equação (4.27) tem o mesmo formato da equação (4.8), que corresponde a um volume interno. Tais equações diferem apenas no coeficiente A_p e no termo b'_p , os quais para os volumes adjacentes às fronteiras carregam as informações da condição de contorno.

Comentários

Após calcular os coeficientes e os termos independentes das equações de todos os volumes de controle da malha, eles podem ser reunidos no sistema linear

$$\mathbb{A}\mathbf{P} = \mathbf{b} \quad (4.29)$$

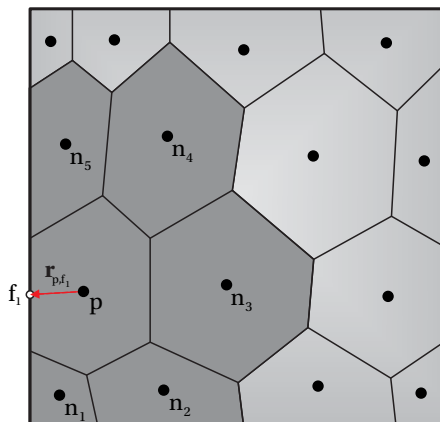


Figura 4.8 – Volume de controle adjacente a uma fronteira.

onde \mathbb{A} é a matriz que contém os coeficientes de todas as equações envolvidas, \mathbf{b} é o vetor dos termos independentes e \mathbf{P} é o vetor de valores discretos de pressão associados aos volumes de controle da malha.

Vale destacar que como o vetor \mathbf{b} contém gradientes determinados com valores discretos de pressão que não necessariamente satisfazem o sistema linear anterior, um processo iterativo é necessário para determinar o campo de pressão que seja a solução do problema considerado. Em cada iteração desse processo o sistema linear da equação (4.29) deve ser resolvido e com a solução correspondente os gradientes de pressão devem ser recalculados. O algoritmo de solução considerado será descrito em detalhes no próximo capítulo.

RESULTADOS

5.1 Introdução

Depois de apresentadas as expressões da equação da conservação da massa discretizada e da aproximação dos fluxos através das faces dos volumes de controle nas malhas poligonais, no presente capítulo procura-se descrever o processo iterativo necessário para se determinar o campo de pressão no domínio. Dois casos são também apresentados com o intuito de avaliar a metodologia numérica descrita neste trabalho.

5.2 Algoritmo de solução

Nesta seção é descrito o algoritmo de solução que foi utilizado para obter os resultados apresentados neste capítulo. O processo iterativo considerado segue os seguintes passos:

1. Estima-se um campo de pressão inicial;
2. Mediante algum dos métodos de reconstrução explícita do gradiente, obtém-se o gradiente de pressão associado a cada volume de controle da malha, utilizando os valores discretos de pressão disponíveis;
3. Monta-se o sistema linear conforme explicado no capítulo 4. Como os coeficientes da matriz \mathbb{A} dependem de parâmetros geométricos e propriedades do fluido e do meio, que são invariáveis, tal matriz

pode ser montada somente a primeira vez que este passo é executado. Já o vetor **b** deve ser atualizado sempre, uma vez que ele depende dos gradientes de pressão;

4. Resolve-se o sistema linear, obtendo-se um novo campo de pressão;
5. Retorna-se para o item 2 e itera-se até que um nível de convergência preestabelecido seja atingido.

O critério considerado no passo 5 para finalizar o processo é que uma norma da variação do campo de pressão entre duas iterações consecutivas seja menor que um valor preestabelecido. A norma considerada, que segue os princípios apresentados em [18], está definida pela expressão

$$\delta_{PI} = \left(\frac{\sum_{i=1}^{Nc} (P_i^n - P_i^{n-1})^2 \Delta V_i}{\sum_{i=1}^{Nc} (P_i^a)^2 \Delta V_i} \right)^{1/2} \quad (5.1)$$

sendo P_i^n e P_i^{n-1} as pressões no volume de controle i no nível iterativo atual e no nível anterior, respectivamente. O somatório é mais uma vez computado considerando-se todos os volumes de controle da malha. Além disso, P_i^a é o valor de pressão no centroide do volume i , correspondente à solução analítica do problema. O denominador da expressão definida na equação (5.1) pode ser interpretado como um valor de normalização da variação do campo de pressão entre iterações. Para todos os resultados apresentados aqui, o processo iterativo foi executado até atingir a condição $\delta_{PI} < 10^{-8}$.

Os resultados aqui apresentados foram obtidos mediante códigos implementados na linguagem C++. A biblioteca ACMLib [29] auxiliou na solução dos sistemas lineares empregando o método *multigrid* de correções aditivas [25].

5.3 Especificação do problema

O problema considerado para testar as metodologias numéricas descritas neste trabalho é o determinado pela equação diferencial de segunda

ordem

$$-\nabla \cdot \mathbb{K} \nabla P = F(x, y) \text{ em } \Omega \quad (5.2)$$

sendo Ω um domínio quadrado unitário e F um termo fonte. A referida equação nada mais é do que a equação da conservação da massa (1.7) considerando ρ e μ valores unitários. Dessa forma, essa equação determina o campo de pressão em um escoamento monofásico no domínio considerado.

No contorno $\partial\Omega$ desse domínio são prescritas condições de Dirichlet

$$P = P_{Dir}(x, y) \text{ em } \partial\Omega \quad (5.3)$$

Dois casos são aqui considerados a fim de avaliar a metodologia numérica descrita neste trabalho. Em ambos os casos o meio é homogêneo e anisotrópico. O tensor permeabilidade, o termo fonte e a solução analítica, correspondentes aos dois casos considerados estão especificados na tabela 5.1. O primeiro caso, em que o tensor permeabilidade é diagonal, é uma variante de um problema apresentado em [25]. O segundo caso foi proposto originalmente em [29].

Tabela 5.1 – Especificação dos casos considerados.

Caso	\mathbb{K}	$P(x, y)$	$F(x, y)$
1	$\begin{pmatrix} K_{xx} & 0 \\ 0 & K_{yy} \end{pmatrix}$	$\frac{\sinh\left(\pi y \sqrt{\frac{K_{xx}}{K_{yy}}}\right)}{\sinh\left(\pi \sqrt{\frac{K_{xx}}{K_{yy}}}\right)} \sinh(\pi x)$	0
2	$\begin{pmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{pmatrix}$	$16x(1-x)y(1-y)$	$-16(3x^2 + 3y^2 + 4xy - 5x - 5y + 1)$

No caso 1 serão considerados diferentes valores para a razão de anisotropia, a qual foi definido como

$$\gamma = \frac{K_{yy}}{K_{xx}} \quad (5.4)$$

A fim de caracterizar o erro associado à solução numérica em uma determinada malha, a seguinte forma adimensional da norma L_2 do erro é considerada

$$\varepsilon_P = \left(\frac{\sum_{i=1}^{N_c} (P_i^n - P_i^a)^2 \Delta V_i}{\sum_{i=1}^{N_c} (P_i^a)^2 \Delta V_i} \right)^{1/2} \quad (5.5)$$

sendo P_i^n o valor discreto de pressão associado ao volume i e P_i^a o valor correspondente à solução analítica no centroide do mesmo volume.

Mais uma vez será analisada a taxa com que a magnitude do erro cai à medida que as malhas são refinadas. Os gráficos exibidos no presente capítulo apresentam as mesmas características daqueles mostrados no capítulo 3, porém aqui a norma do erro é relacionada com a variável pressão. A análise é da mesma forma realizada, considerando-se as malhas anteriormente empregadas. As siglas mostradas nas tabelas 3.4 e 3.5 continuam a ter o mesmo significado.

5.4 Resultados para o caso 1

Neste caso a permeabilidade é dada por um tensor diagonal e a equação diferencial da pressão não apresenta o termo fonte. As condições de contorno deste problema são mostradas na figura 5.1. Percebe-se que somente no topo do domínio, em $y = 1$, a pressão prescrita não é nula.

A primeira análise feita é um comparativo dos quatro métodos de reconstrução do gradiente que se destacaram nos testes realizados no capítulo 3, considerando-se para isto as malhas regulares. Em seguida, para um mesmo método de reconstrução, as análises da convergência da pressão e do gradiente são realizadas considerando-se as diferentes malhas mostradas no capítulo mencionado. Por fim, uma avaliação da influência da razão de anisotropia γ é efetuada.

5.4.1 Análise da influência dos métodos de reconstrução

Na figura 5.2 estão apresentados os resultados referentes à convergência dos métodos de reconstrução GGCBW_1S, GGCBW_2S, GGVBPL e LSSID utilizando-se as malhas regulares. O valor considerado para a razão de anisotropia é $\gamma = 10$.

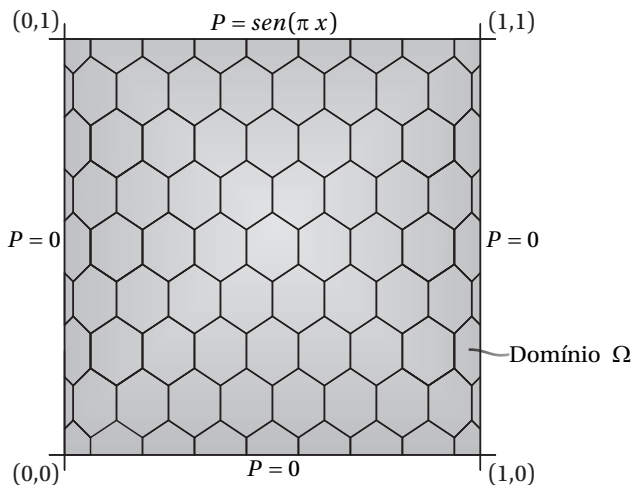


Figura 5.1 – Domínio com as condições de contorno do caso 1. Malha regular.

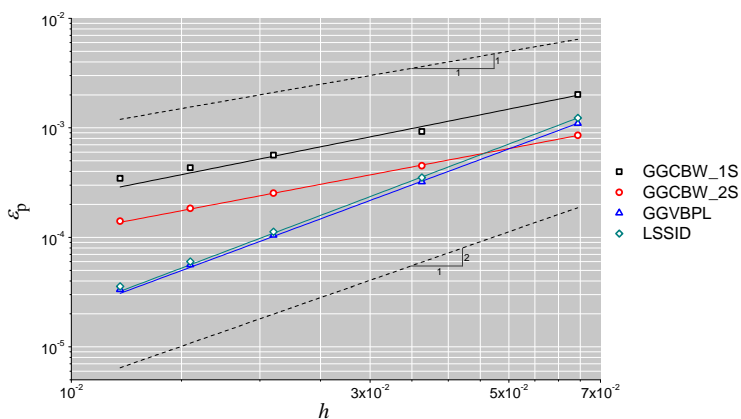


Figura 5.2 – Convergência da pressão nas malhas regulares. Caso 1.

Percebe-se na figura 5.2 que os métodos que utilizam a fórmula de Green-Gauss com abordagem *cell-based* apresentam convergência similar entre si e levemente superior que de primeira ordem. A magnitude da norma do erro da pressão é visivelmente menor naquele com dois passos.

Os outros dois métodos encontrados no gráfico da figura 5.2 se destacam com relação à convergência, ligeiramente superior à segunda ordem, assim como com relação à própria magnitude do erro. Apesar do método que utiliza mínimos quadrados apresentar valores da norma do erro um pouco superiores, principalmente nas malhas mais grosseiras, percebe-se que a tendência é que estes valores se tornem menores que aqueles obtidos com GGVBPL.

5.4.2 Análise da influência da geometria das malhas

Considerando especificamente o método LSSID, procura-se analisar a influência das particularidades geométricas das malhas na convergência da pressão e do gradiente. Mais uma vez γ apresenta o valor 10.

Infelizmente o esquema numérico adotado para o cálculo dos fluxos não é suficientemente robusto. A convergência não foi obtida nas malhas com razão de aspecto alta (RA) e com distorção senoidal (DS). O problema se encontra no processo iterativo e não nas soluções dos sistemas lineares, já que estas foram possíveis de serem atingidas. Em virtude do exposto, os gráficos aqui mostrados apresentam somente os resultados referentes às malhas regulares (RE), não-conformes (NC) e com distorção aleatória (DA).

Na figura 5.3 são apresentados os resultados da norma do erro da pressão nas três malhas citadas anteriormente. A convergência é praticamente de segunda ordem, sendo a inclinação ligeiramente superior nas malhas RE. Nota-se um incremento um pouco mais acentuado nos valores da norma do erro considerando as malhas NC. Porém, pode-se afirmar que as particularidades encontradas nas malhas NC e DA não têm grande influência nos resultados comparando-se com aqueles obtidos nas malhas RE.

Na figura 5.4 é feita uma comparação entre os valores de pressão obtidos com a solução analítica (P_a) do caso 1 e a solução numérica correspondente (P_{num}). A malha analisada é a regular sendo os valores de pressão correspondentes aos volumes de controle cujos centroides se encontram na linha média $x = 1/2$. Percebe-se no gráfico a grande similaridade entre as soluções analítica e numérica.

Procurou-se também verificar a convergência do gradiente, da mesma maneira realizada no capítulo 3. Com a solução do campo de pressão determinada ao fim da simulação aplicou-se novamente o método de re-

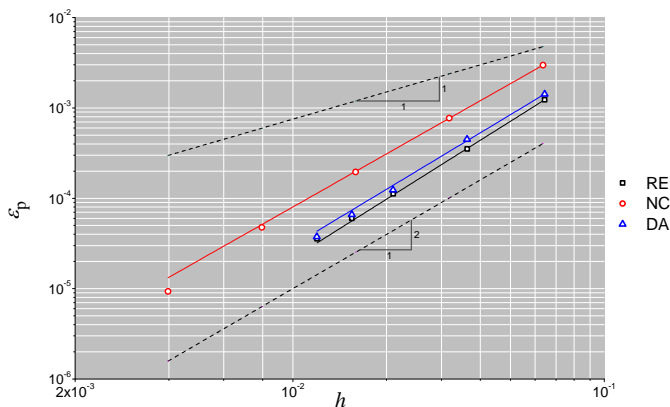


Figura 5.3 – Convergência da pressão considerando LSSID. Caso 1.

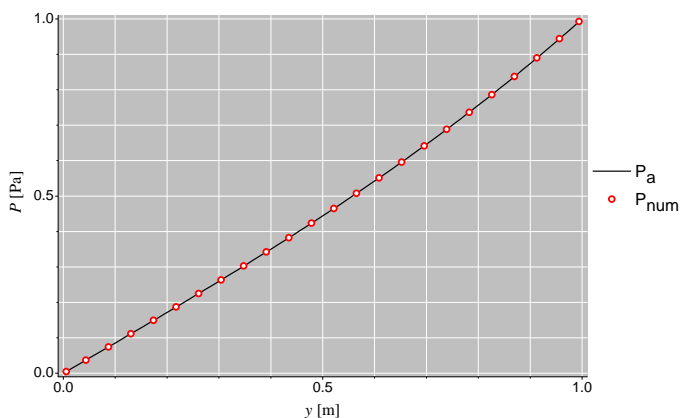


Figura 5.4 – Comparação entre a pressão obtida com as soluções analítica e numérica na malha RE com 2232 volumes de controle.

construção LSSID para obter a aproximação numérica do gradiente. Essa aproximação foi então comparada com o gradiente obtido a partir da solução analítica.

A diferença com relação aos resultados do capítulo 3 é que agora além dos erros associados à reconstrução do gradiente se adicionam os erros do próprio campo de pressão, que não é mais o exato. O gráfico da figura 5.5 mostra os valores da norma do erro do gradiente nas três malhas RE, NC e

DA.

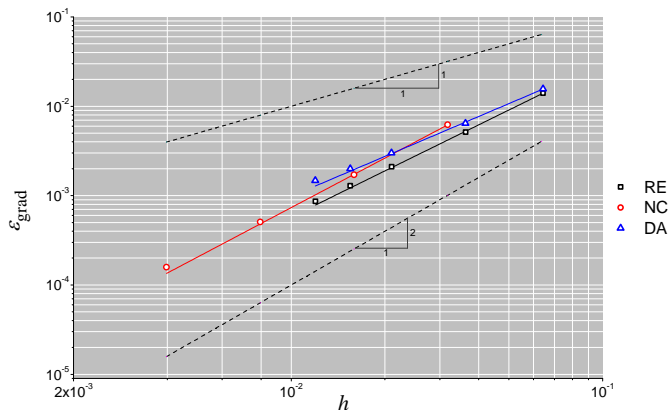


Figura 5.5 – Convergência do gradiente considerando LSSID. Caso 1.

Como se pode observar as ordens de convergência obtidas são superiores à unidade, com destaque para as malhas NC.

5.4.3 Análise da influência da razão de anisotropia

Considerando novamente as malhas regulares e o método de reconstrução LSSID, procura-se verificar agora se diferentes valores da razão de anisotropia influenciam a convergência da pressão. Situações com valores deste parâmetro maiores e menores que a unidade são apresentadas nas figuras a seguir.

Na figura 5.6 variam-se os valores de γ entre 1 e 10000. Um valor unitário deste parâmetro caracteriza o meio como isotrópico, já um alto valor indica que o escoamento se dá preferencialmente na direção do eixo y , pois para esse caso a componente K_{yy} é maior que K_{xx} .

Analisando a figura 5.6 nota-se que ao se aumentar o valor de γ , os erros não apresentam um comportamento monotônico. Percebe-se que, para uma dada malha, ao aumentar o valor do parâmetro da razão de 1 para 10 tem-se uma redução do erro e também um aumento na ordem de convergência, caracterizando assim uma melhora nos resultados. Porém, ao se aumentar o parâmetro de 100 para 1000 o efeito contrário ocorre.

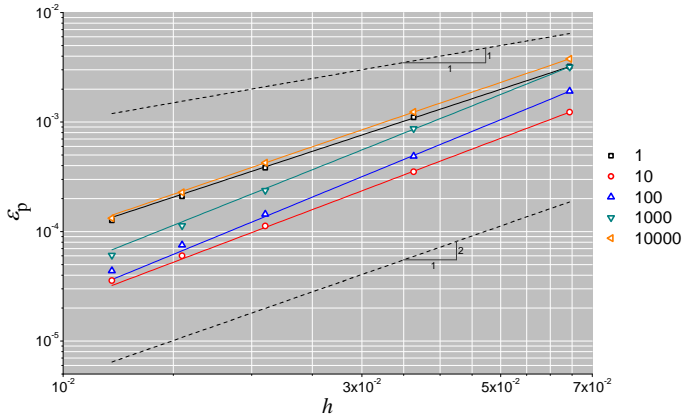


Figura 5.6 – Convergência da pressão considerando valores do parâmetro γ entre 1 e 10000.

Percebe-se na figura 5.6 que um meio anisotrópico, considerando γ com valores de no máximo 1000, apresenta melhores resultados comparando-se com o caso de um meio isotrópico. Porém, os resultados com uma mais alta anisotropia passam a se equivaler àquele isotrópico. Vale destacar que o máximo valor de γ apresentado na figura não é um valor limitante, sendo possível obter resultados utilizando-se valores maiores para essa razão.

No gráfico da figura 5.7 são analisados valores de γ unitário e menores que a unidade. Parte-se de um meio isotrópico até um anisotrópico com uma razão de anisotropia de 0.001. Valores com uma mais baixa ordem de grandeza apresentaram resultados em que não há mais a influência do refino na convergência, isto é, a linha de convergência passa a ser praticamente horizontal. Vale destacar que valores do referido parâmetro menores que a unidade caracterizam um meio em que o escoamento ocorre preferencialmente ao longo do eixo x .

Ao observar o gráfico da figura 5.7 nota-se que existe um comportamento monotônico nos resultados, diferentemente do que ocorre no gráfico da figura 5.6. À medida que o meio se torna cada vez mais anisotrópico os resultados se tornam cada vez menos precisos, até o limite máximo onde o refino já não é mais sentido.

A fim de verificar se há influência da disposição da malha com relação às condições de contorno pensou-se em rotacionar o problema original

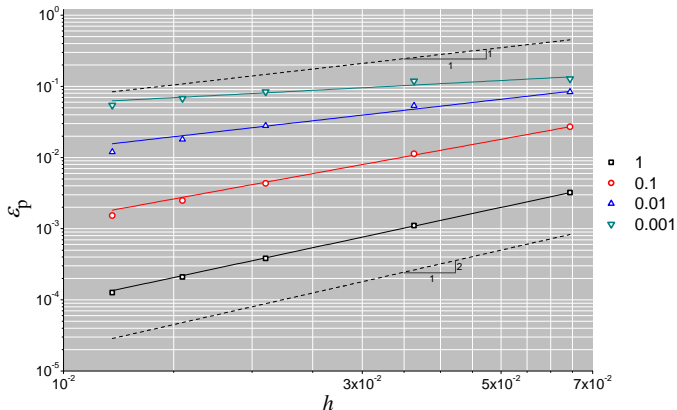


Figura 5.7 – Convergência da pressão considerando valores de γ unitário e menor que a unidade.

apresentado na figura 5.1 e realizar a mesma análise da variação de γ . Vale destacar que os problemas original e rotacionado, apesar da nomenclatura diferenciada, são idênticos, apresentando o segundo a condição de contorno senoidal na lateral direita do domínio quadrado (ver figura 5.8). Logicamente, a análise anteriormente feita com o valor de γ maior que a unidade será agora realizada com o valor do parâmetro menor que um e vice versa. Assim, a situação onde no problema original $\gamma = 10$ é a mesma daquela em que $\gamma = 0.1$ no problema rotacionado.

Percebe-se através dos resultados obtidos com o problema rotacionado, mostrados nas figuras 5.9 e 5.10, um comportamento similar ao visto no problema original. Em um deles nota-se a influência negativa do aumento da anisotropia, onde as linhas de convergência tornam-se linhas horizontais e no outro resultados que não possuem um comportamento monotônico.

As figuras 5.6 e 5.9, referentes ao problema original e rotacionado respectivamente, ilustram os resultados de situações idênticas onde o escoamento se dá preferencialmente ao longo do eixo perpendicular à fronteira com condição de contorno senoidal. Apesar da semelhança visível percebe-se que com o problema rotacionado os valores da norma do erro são menores.

Analisando agora as figuras 5.7 referente ao problema original e 5.10 ao rotacionado, percebe-se que o aumento da anisotropia torna os resul-

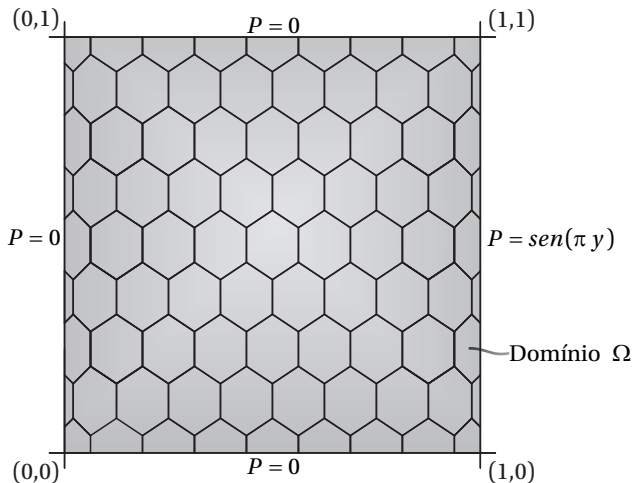


Figura 5.8 – Problema rotacionado. Domínio discretizado com a malha regular.

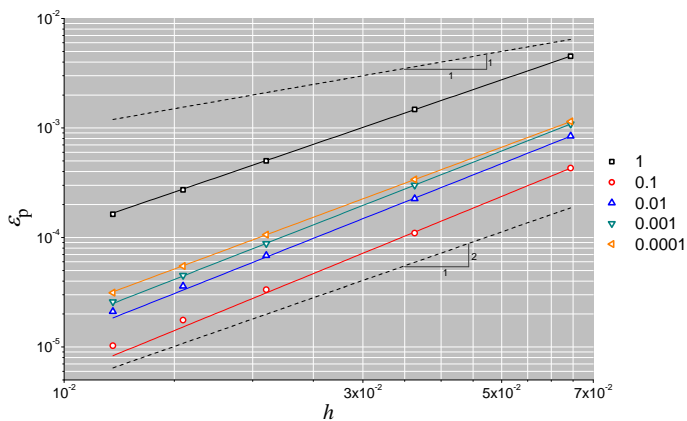


Figura 5.9 – Convergência da pressão considerando valores de γ entre 1 e 0.0001. Problema rotacionado.

tados cada vez mais distantes dos valores exatos. Novamente esses resultados, considerando situações idênticas, não são exatamente iguais. O segundo gráfico apresenta somente valores até $\gamma = 100$ pois valores superiores fazem com que as normas do erro não diminuam com o refino da malha.

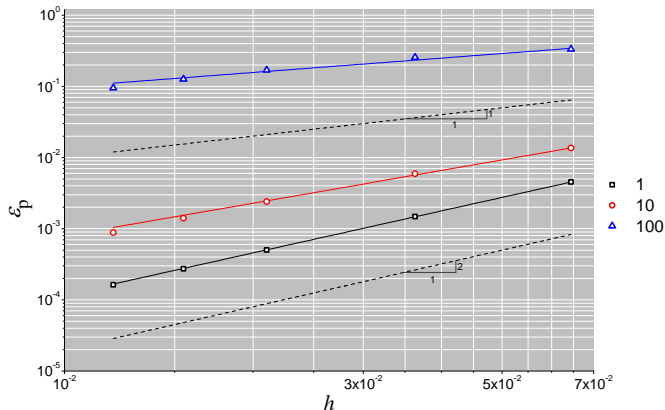


Figura 5.10 – Convergência da pressão considerando valores de γ entre 1 e 100. Problema rotacionado.

A partir das análises feitas conclui-se que os resultados não estão sendo influenciados de maneira substancial pela disposição da malha regular com relação às condições de contorno do problema. Mesmo os valores da norma do erro não sendo exatamente iguais ao se considerar situações idênticas, o comportamento dos resultados é o mesmo.

5.4.4 Comentários

Na seção referente à análise das malhas comentou-se que resultados não foram obtidos naquelas com distorção senoidal e com razão de aspecto alta. O método de reconstrução explícita do gradiente utilizado foi o LSSID em conjunto com o valor de $\gamma = 10$.

Como o método iterativo ponto a ponto de Gauss-Seidel é utilizado para solucionar os sistemas lineares de equações, o principal requisito para sua convergência é a dominância diagonal da matriz dos coeficientes. Aplicando o critério de Scarborough encontrado em [25], que estipula a condição suficiente para a convergência de um método iterativo ponto a ponto, verificou-se que as matrizes dos coeficientes geradas nas malhas DS e RA satisfazem tal critério. O fato de que durante o processo iterativo as soluções dos sistemas lineares foram obtidas confirma o exposto.

A impossibilidade em obter soluções numéricas ao se analisar as malhas DS e RA pode estar relacionada com a grande importância do termo

explícito na equação do fluxo. Em virtude disso, um novo esquema numérico empregando uma formulação totalmente implícita foi implementado no conjunto de bibliotecas *Orion*. O fluxo neste novo esquema é determinado considerando-se os valores de pressões atuais, sendo assim, por exemplo, a derivada $(\partial_y P)_p^*$ aparente na equação (4.21) não é mais um valor já conhecido. Essa derivada parcial é determinada agora considerando o princípio dos métodos que empregam mínimos quadrados, necessitando das pressões atuais localizadas nos volumes de controle vizinhos ao analisado, pressões estas que são incógnitas do sistema. Com isso, a equação do fluxo de massa (4.24) além de levar em consideração os volumes p e n , também envolve os vizinhos desses volumes, portanto, o método totalmente implícito possui um estêncil com dois níveis de vizinhança. Ao se considerar um volume de controle central da malha regular, por exemplo, um estêncil três vezes maior é necessário neste novo esquema. A consequência do emprego do esquema totalmente implícito é um aumento considerável da quantidade de termos não-nulos na matriz do sistema linear.

A figura 5.11 apresenta os resultados da norma do erro da pressão nas malhas DS e RA utilizando-se o método totalmente implícito e considerando $\gamma = 10$. Ela vem a confirmar o exposto no parágrafo anterior já que agora a convergência é obtida. Os resultados são muito similares, convergência de aproximadamente segunda ordem, verificando-se que o esquema é insensível às particularidades das malhas.

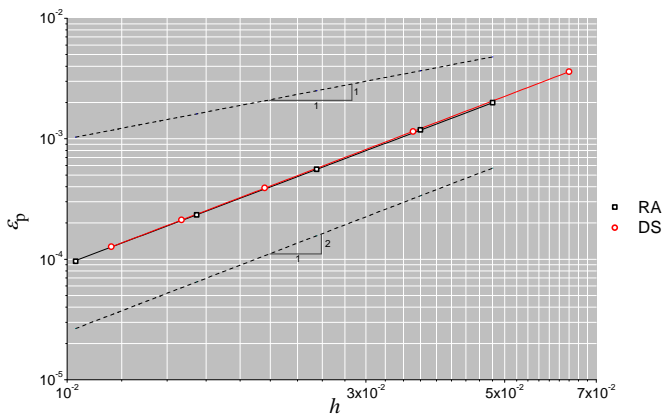


Figura 5.11 – Convergência da pressão considerando o esquema totalmente implícito nas malhas DS e RA.

Conclui-se então que o esquema numérico para obtenção dos fluxos através das faces das malhas poligonais apresentado neste trabalho contém um ponto que deve ser analisado com mais cuidado. Este ponto-chave é o termo explícito que está afetando a convergência da solução numérica em alguns casos. É portanto necessário fazer um estudo mais aprofundado dos seus parâmetros dando uma atenção especial à transformação local de coordenadas que pode vir a alterá-los.

5.5 Resultados para o caso 2

Neste segundo caso a permeabilidade é dada pelo tensor cheio especificado na tabela 5.1. Os autovalores desse tensor são 1 e 2, enquanto que suas direções principais estão rotacionadas 45° em relação aos eixos cartesianos. No referido caso utilizou-se a técnica das soluções manufaturadas [18] onde se propõe a solução exata da equação diferencial e através de diferenciação obtém-se a expressão do termo fonte associado.

Conforme mostrado na figura 5.12, no caso 2 a pressão é nula em todo o contorno do domínio.

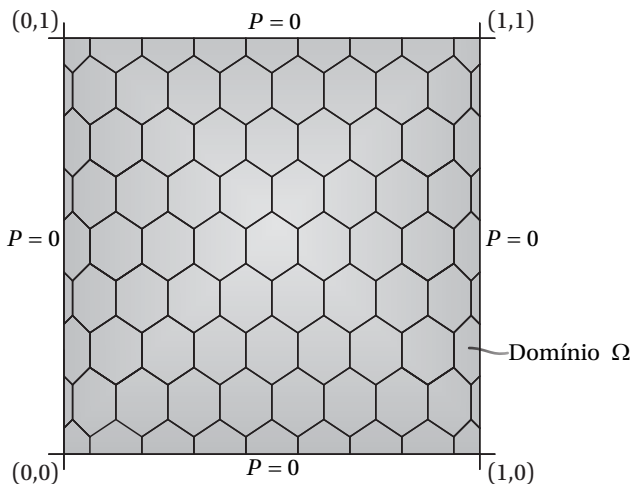


Figura 5.12 – Domínio físico com as condições de contorno do caso 2.

As análises feitas seguem a mesma ideia daquelas apresentadas para o caso 1. Primeiramente apresentam-se os valores da norma do erro da

pressão utilizando-se os mesmos quatro métodos de reconstrução explícita do gradiente aplicados nas malhas regulares. A seguir, utilizando-se um desses métodos variam-se as malhas com o intuito de determinar as normas do erro da pressão e do gradiente.

5.5.1 Análise da influência dos métodos de reconstrução

Na figura 5.13 encontram-se expostos os valores das normas do erro considerando os métodos GGCBW_1S, GGCBW_2S, GGVBPL e LSSID nas malhas regulares.

Nota-se que para este caso levemente anisotrópico os quatro métodos apresentam resultados muito similares. A convergência é de aproximadamente segunda ordem em todos os métodos podendo-se afirmar que apesar de GGCBW_2S apresentar resultados levemente melhores, o desempenho dos quatro métodos é praticamente o mesmo. Uma vez que os resultados da figura 5.13 foram obtidos com malhas regulares, deve-se verificar se o mesmo ocorre com malhas apresentando algum tipo de distorção.

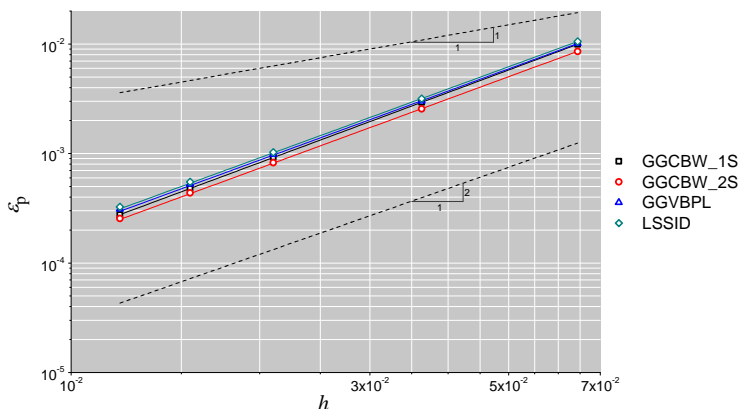


Figura 5.13 – Convergência da pressão nas malhas regulares. Caso 2.

5.5.2 Análise da influência da geometria das malhas

Como os resultados dos quatro métodos apresentaram-se muito similares nas malhas regulares, repetiu-se o experimento numérico nas de-

mais malhas. Constatou-se que com nenhum dos métodos obteve-se a convergência no processo iterativo ao se empregar as malhas DS e RA. Para aqueles que utilizam a fórmula de Green-Gauss com abordagem *cell-based*, nas malhas DA não se obteve uma redução consistente do erro.

Os métodos GGVBP e LSSID produziram resultados aceitáveis nas malhas RE, NC e DA. Na figura 5.14 mostra-se o comportamento da norma do erro da pressão empregando este último método.

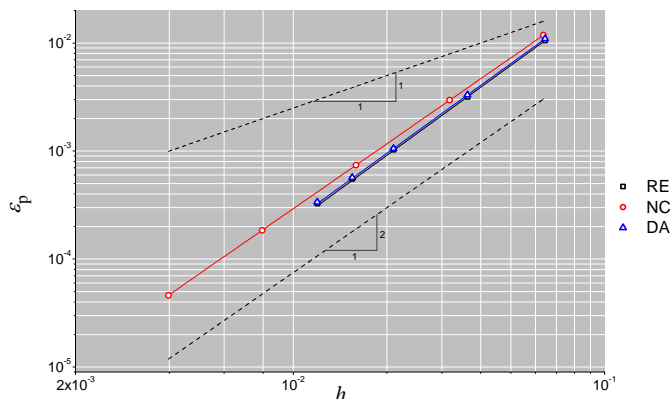


Figura 5.14 – Convergência da pressão nas malhas RE, NC e DA. Método LSSID, caso 2.

Nota-se uma grande similaridade nos resultados, sendo que nas malhas NC o erro é levemente maior e a ordem de convergência levemente inferior. Assim, independentemente das particularidades das malhas o esquema numérico consegue tratá-las. Vale destacar que para o caso 2 a ordem de convergência é aproximadamente 2 nas três malhas apresentadas.

Na figura 5.15 mostra-se o comportamento da norma do erro do gradiente. Percebe-se que o comportamento do erro é melhor nas malhas regulares, seja com relação ao valor da ordem de convergência ou à própria magnitude do erro. As ordens de convergência apresentam valores em torno de 1.5.

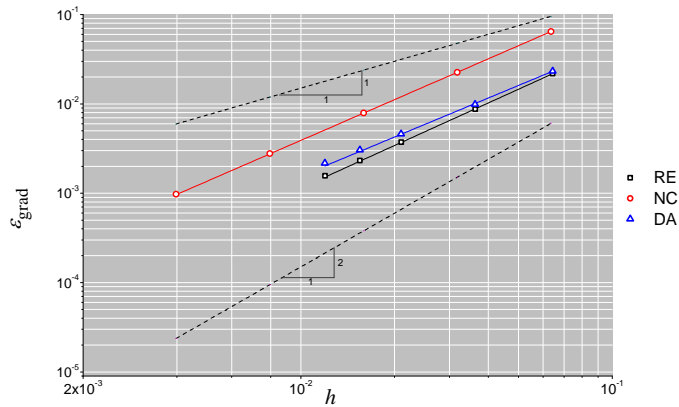


Figura 5.15 – Convergência do gradiente de pressão nas malhas RE, NC e DA. Método de reconstrução LSSID, caso 2.

CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo principal comparar diferentes metodologias para reconstrução do gradiente em malhas poligonais. No longo prazo, pela generalidade desse tipo de malhas, espera-se que malhas poligonais e poliédricas possam ser empregadas na discretização de regiões de geometria intrincada. O presente trabalho contribuiu na fase inicial de um projeto de P&D em desenvolvimento no laboratório SINMEC, cujo objetivo final é aplicação do tipo de malhas poligonais e poliédricas para a discretização de regiões de transição em reservatórios de petróleo.

Métodos de reconstrução explícita do gradiente foram descritos e analisados com o intuito de se determinar quais seriam os mais adequados para uma aplicação na discretização de um modelo de escoamento em reservatórios. Com base em uma série de experimentos numéricos, o desempenho dos diferentes métodos considerados foi analisado sob a ótica da precisão e do tempo de computação demandado. Para tanto, verificou-se como o erro de truncamento nas aproximações se reduz e como o tempo computacional aumenta à medida que as malhas são refinadas. Após analisar os métodos de reconstrução do gradiente, foi descrita uma estratégia para aplicar esses métodos na discretização dos termos de fluxo nas equações de conservação. Essa estratégia consiste na aproximação do fluxo em uma face considerando uma parcela implícita, envolvendo os valores de pressão nos dois volumes adjacentes à face, e uma parcela explícita que leva em conta a denominada difusão cruzada. Essa parcela explícita depende dos valores do gradiente aproximados com algum dos métodos de

reconstrução descritos previamente. Alguns resultados obtidos aplicando essa estratégia à discretização de uma modelo de escoamento monofásico foram apresentados também neste trabalho.

6.1 Principais conclusões

A bateria de testes realizados com os métodos de reconstrução explícita do gradiente de pressão possibilitou analisar o comportamento destes em diferentes situações. Seus pontos fortes e suas deficiências puderam ser evidenciados tanto com relação à precisão na aproximação do gradiente bem como com relação ao tempo de computação associado.

Os métodos de reconstrução que se destacaram foram aqueles que, apesar de apresentarem um tempo de execução igual ou levemente superior aos demais, compensaram tal fato com resultados numéricos mais precisos e apresentando maior robustez. Dentre eles, o método de Green-Gauss com abordagem *vertex-based* aplicando o procedimento do pseudolaplaciano (GGVBPL) e o método que aplica mínimos quadrados (LS-SID) mostraram que podem fornecer aproximações mais precisas, inclusive quando as malhas apresentam distorções geométricas importantes. A expectativa em encontrar bons resultados neste último se confirmou já que segundo seu princípio a geometria dos volumes de controle não é levada em consideração.

Já o esquema numérico proposto para a aproximação dos fluxos nas faces dos volumes de controle das malhas poligonais não se mostrou suficientemente robusto. Não foi possível obter soluções numéricas com algumas malhas testadas. Constatou-se que quando a parcela explícita é maior que a parcela implícita em algumas faces da malha a convergência do processo iterativo é prejudicada, ou inclusive impossibilitada em alguns casos com níveis de anisotropia altos. Um estudo mais detalhado a respeito da estratégia de aproximação dos fluxos deve ser realizado a fim de determinar maneiras para contornar tal anomalia. A forma pela qual é realizada a transformação local de coordenadas em cada face pode ser a questão-chave que determina a robustez do esquema numérico. Alguns progressos nesse aspecto já foram alcançados no projeto de P&D comentado, durante o período em que esta dissertação foi redigida.

Os princípios que norteiam os métodos de reconstrução do gradiente podem ser empregados em outros esquemas numéricos até mesmo em

um que aproxima os fluxos de forma totalmente implícita. Sendo assim, a implementação computacional dos métodos de reconstrução não limita seu uso a apenas o esquema numérico descrito neste trabalho. Com o referido esquema totalmente implícito foi possível obter resultados em malhas cuja anisotropia estava influenciando negativamente a convergência ao se empregar o esquema proposto neste trabalho. Este fato poderia induzir o abandono do esquema com a parcela explícita, contudo, deve-se ressaltar que o esquema totalmente implícito aumenta consideravelmente o estêncil associado à equação de conservação discretizada para um volume de controle. Isto pode tornar mais difícil a solução dos sistemas lineares com métodos iterativos e aumenta consideravelmente a demanda de memória para executar o código associado. Essas dificuldades podem ser contornadas de alguma forma em problemas bidimensionais, contudo, em casos tridimensionais a situação seria mais crítica pois o número de vizinhos de um volume poliédrico aumenta consideravelmente.

Como sugestões para trabalhos futuros, além da análise mais criteriosa da aproximação dos fluxos nas faces já comentada, seria interessante: considerar problemas cujas condições de contorno nas fronteiras são de Neumann, mais especificamente de fluxo nulo já que esta é a condição normalmente utilizada em reservatórios, realizar um estudo mais detalhado do processo iterativo com o objetivo de reduzir o tempo computacional para a solução do problema e por fim realizar um estudo mais detalhado dos métodos de reconstrução para que eles sejam capazes de tratar uma possível heterogeneidade no meio.

REFERÊNCIAS

- [1] AHMED, T. **Reservoir engineering handbook**, third edition. Elsevier Inc., 2006.
- [2] AMBRUS, J. **Volumes finitos utilizando aproximações de múltiplos pontos aplicados à simulação numérica de reservatórios de petróleo**. Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2009.
- [3] ANSYS INC. **ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide**, 2009.
- [4] ANSYS INC. **ANSYS FLUENT 12.0 User's Guide**, 2009.
- [5] ANSYS INC. **ANSYS ICEM CFD 12.0 Tutorial Manual**, 2009.
- [6] AZIZ, K.; SETTARI, A. **Petroleum reservoir simulation**. Applied Science Publishers LTD, 1979.
- [7] BENNIS, C.; BOROUCAKI, H.; FLANDRIN, N. **3D conforming power diagrams for radial LGR in CPG reservoir grids**. *Engineering with Computers*, v. 24, pp. 253–265, 2008.
- [8] BOOST. **Boost C++ Libraries**. <http://www.boost.org>, 2012.
- [9] BORISENKO, A.; TARAPOV, I. **Vector and tensor analysis with applications**, revised english edition. Dover Publications Inc., 1979.
- [10] BREZZI, E.; LIPNIKOV, K.; SHASHKOV, M.; SIMONCINI, V. **A new discretization methodology for diffusion problems on generalized polyhedral meshes**. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. v. 196, pp. 3682–3692, 2007.
- [11] CEI INC. **Ensignt User Manual**, 2009.
- [12] CRAFT, B.; HAWKINS, M. **Applied petroleum reservoir engineering**, second edition. Prentice-Hall Inc., 1991.

- [13] DEMMEL, J. W. **Applied numerical linear algebra**. Society for Industrial and Applied Mathematics, Berkeley, California, 1997.
- [14] GESSNER, T.; LIM, C. K.; POTDAR, S. **A strategy to convert unstructured meshes into polyhedra meshes**. Ansys Inc., 2006.
- [15] GOLUB, G.; LOAN, C. **Matrix computations**, third edition. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1996.
- [16] HOLMES, D. G.; CONNELL, S. D. **Solution of the 2D Navier–Stokes equations on unstructured adaptive grids**. *Proceedings of the AIAA 9th Computational Fluid Dynamics Conference*, Buffalo, USA, pp. 25–39, 1989.
- [17] HURTADO, F. S. V. **Uma formulação de volumes finitos baseada em elementos para a simulação do deslocamento bifásico imiscível em meios porosos**. Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005.
- [18] HURTADO, F. S. V. **Formulação tridimensional de volumes finitos para solução de reservatórios de petróleo com malhas não-estruturadas híbridas**. Tese de doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2011.
- [19] JAWAHAR, P.; KAMATH, H. **A high-resolution procedure for Euler and Navier-Stokes computations on unstructured grids**. *Journal of Computational Physics*, v. 164, pp. 165–203, 2000.
- [20] JAYANTA, P. A.; TURNER, I. W. **A comparison of gradient approximations for use in finite-volume computational models for two-dimensional diffusion equations**. 2001.
- [21] KELECY, F. J. **Using polyhedral cells in Fluent 6.3**. Ansys Inc., 2006.
- [22] KUMAR, M.; DUFFY, C.; SALVAGE, K. **A second-order accurate, finite volume-based, integrated hydrologic modeling (FIHM) framework for simulation of surface and subsurface flow**. *Vadose Zone*, v. 8, n. 4, pp. 873–890, November, 2009.
- [23] LEE, H.; JEONG, J. J.; CHO, H. K.; YOON, H. Y. **An improved numerical scheme to evaluate the pressure gradient on unstructured meshes for**

- two-phase flow analysis.** *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 37, pp. 1273–1279, 2010.
- [24] LEVEQUE, R. J. **Finite-volume methods for hyperbolic problems.** Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2002.
- [25] MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluido computacional.** 2ª edição. LTC Editora, Rio de Janeiro, Brasil, 2004.
- [26] MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; TADA, M. P.; KARPINSKI, L.; SOPRANO, A. B.; PESCADOR, A. V. B.; RIBEIRO, G. G.; MAGRI, V. A. P. **Desenvolvimento de um aplicativo para a simulação do escoamento acoplado poço-reservatório (WellRes).** Relatório Final UFSC-0050, Laboratório SINMEC/UFSC, Florianópolis, Brasil, 2012.
- [27] MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V.; PESCADOR, A. V. B.; RIBEIRO, G. G.; GREIN, E. A.; CERBATO, G. **Introdução às malhas poliédricas e ao método baseado na reconstrução explícita do gradiente.** Relatório técnico SINMEC/SIGER II-01, Laboratório SINMEC/UFSC, Florianópolis, Brasil, 2012.
- [28] MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V.; PESCADOR, A. V. B.; RIBEIRO, G. G.; CERBATO, G.; GREIN, E. A. **Simulação de reservatórios de petróleo pelo método EbFVM com solver multigrid (SIMREP).** Relatório técnico nº 7, Laboratório SINMEC/UFSC, Florianópolis, Brasil, 2011.
- [29] MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V.; DONATTI, C. N.; PESCADOR, A. V. B. **Simulação de reservatórios de petróleo pelo método EbFVM com solver multigrid (SIMREP).** Relatório técnico nº 4, Laboratório SINMEC/UFSC, Florianópolis, Brasil, 2009.
- [30] MATHUR, S. R.; MURTHY, J. Y. **A pressure-based method for unstructured meshes.** *Numerical Heat Transfer, Part B*, v. 31, pp. 195–215, 1997.
- [31] MOUNTON, T.; BENNIS, C.; BOROUCHAKI, H. **Hybrid mesh generation for reservoir flow simulation in CPG grids.** *Proceedings of the 18th International Meshing Roundtable*, 2009.
- [32] ORIGIN LAB CORPORATION. **Origin 8 User Guide**, 2007.

- [33] PAPANASTASIOU, T. C.; GEORGIOU, G. C.; ALEXANDROU, A. N. **Viscous fluid flow**. CRC Press LLC, 2000.
- [34] ROSA, A. J.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de reservatórios de petróleo**. Editora Interciência, Rio de Janeiro, 2006.
- [35] STANDARDS, N. I. O.; TECHNOLOGY. **TNT - Template numerical toolkit**. <http://math.nist.gov/tnt/documentation.html>, 2004.
- [36] STRANG, G. **Linear algebra and its applications**, third edition. Harcourt Brace Jovanovich College, San Diego, USA, 1988.
- [37] TADA, M. P. **Análise de esquemas numéricos de cinco e nove pontos para malhas tipo corner-point**. Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2009.
- [38] THOMAS, J. L.; DISKIN, B.; RUMSEY, C. **Towards verification of unstructured-grid solvers**. *American Institute of Aeronautics and Astronautics, Paper AIAA 2008-666*, 2008.

A

DEDUÇÕES RELATIVAS AO PROCEDIMENTO DO PSEUDOLAPLACIANO

O procedimento do pseudoplaciano tem como objetivo determinar valores dos fatores de ponderação para a aproximação da pressão nos vértices da malha, de modo que tal aproximação possua precisão de segunda ordem. A figura A.1 ilustra os elementos geométricos relacionados ao procedimento, sendo \mathbf{r}_v o vetor posição do vértice considerado e \mathbf{r}_{p_k} o vetor posição do centroide de um volume de controle adjacente ao vértice. As coordenadas cartesianas do vetor \mathbf{r}_v serão representadas por x_v e y_v , enquanto as coordenadas cartesianas do vetor posição \mathbf{r}_{p_k} serão representadas por x_{p_k} e y_{p_k} .

A.1 Condição de pseudolaplaciano nulo

A dedução da condição de pseudolaplaciano nulo apresentada a seguir segue os passos descritos em [27].

O valor de pressão em um ponto próximo a um vértice da malha pode ser obtido utilizando-se uma expansão em série de Taylor em torno de v ,

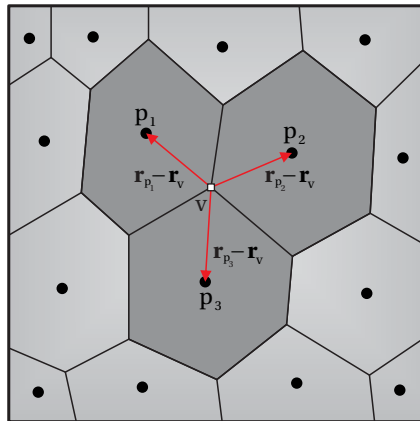


Figura A.1 – Elementos geométricos envolvidos no procedimento de pseudolaplaciano.

conforme equação abaixo

$$P = \check{P}_v + (\nabla \check{P})_v \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_v) + O(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_v|^2) \quad (\text{A.1})$$

sendo \check{P}_v e $(\nabla \check{P})_v$ os valores exatos da pressão e do seu gradiente no vértice analisado. Considerando que os centroides dos volumes de controle circundantes estão suficientemente próximos a tal vértice, a equação anterior pode ser particularizada para cada um desses centroides, resultando a expressão

$$P_{p_k} = \check{P}_v + (\nabla \check{P})_v \cdot (\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v) + O(|\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v|^2) \quad (\text{A.2})$$

O termo referente à aproximação de segunda ordem leva em consideração a distância entre o centroide do volume de controle e o vértice em questão. Considera-se aqui que as dimensões dos volumes de controle da malha podem ser caracterizadas por um comprimento característico h e que a distância entre o centroide do volume de controle e o vértice em questão é proporcional a tal comprimento. Com isso, o erro de truncamento ¹ da aproximação numérica apresentada na equação (A.2) é de segunda ordem, sendo proporcional a h^2 .

Ao somar as equações equivalentes à equação (A.2), correspondentes

¹Os erros de truncamento devem tender a zero quando a malha tender a possuir um número infinito de pontos [25].

a todos os volumes de controle cercando um vértice, multiplicadas pelos respectivos fatores de ponderação, obtém-se a seguinte expressão

$$\sum_{k=1}^{N_v} w_k P_{p_k} = \check{P}_v \sum_{k=1}^{N_v} w_k + \sum_{k=1}^{N_v} w_k (\nabla \check{P})_v \cdot (\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v) + O(h^2) \quad (\text{A.3})$$

sendo a ordem de aproximação ainda proporcional a h^2 , pois este termo independe de w_k .

A operação anterior foi feita com o intuito de estimar a ordem do erro associado à aproximação realizada na equação (2.20), utilizada para se encontrar os valores de pressão nos vértices. Tal equação é aqui repetida por clareza

$$P_v = \frac{\sum_{k=1}^{N_v} w_k P_{p_k}}{\sum_{k=1}^{N_v} w_k} \quad (\text{A.4})$$

Percebe-se que o primeiro termo da equação (A.3) é exatamente o numerador encontrado no lado direito da equação (A.4). Assim, substituindo-se a primeira equação na segunda encontra-se

$$P_v = \check{P}_v + \frac{\sum_{k=1}^{N_v} w_k (\nabla \check{P})_v \cdot (\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v)}{\sum_{k=1}^{N_v} w_k} + O(h^2) \quad (\text{A.5})$$

sendo P_v e \check{P}_v , respectivamente, o valor de pressão aproximado e o valor de pressão exato. A diferença entre eles, o erro, apresenta em geral uma aproximação de primeira ordem, já que o vetor diferença $(\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v)$ é proporcional a h .

A situação ideal seria que a aproximação considerada tivesse erro de segunda ordem. A equação (A.5) mostra que isso aconteceria se o segundo termo no lado direito se anulasse. A condição suficiente para tanto é que

$$\sum_{k=1}^{N_v} w_k (\nabla \check{P})_v \cdot (\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v) = 0 \quad (\text{A.6})$$

De acordo com as propriedades do produto escalar, a expressão anterior pode ser escrita na forma equivalente

$$(\nabla \check{P})_v \cdot \sum_{k=1}^{N_v} w_k (\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v) = 0 \quad (\text{A.7})$$

A igualdade anterior é satisfeita se

$$\sum_{k=1}^{N_v} w_k (\mathbf{r}_{p_k} - \mathbf{r}_v) = 0 \quad (\text{A.8})$$

A última expressão apresentada é exatamente a condição conhecida na literatura como condição de pseudolaplaciano nulo. Com ela pode-se determinar quais valores de w_k fazem com que a aproximação dos valores nos vértices seja de segunda ordem.

A.2 Obtenção dos fatores de ponderação

Um problema de minimização sujeito a restrições pode ser resolvido através do método dos multiplicadores de Lagrange [15]. O referido método foi utilizado em [22] com o mesmo objetivo aqui apresentado, determinar os desvios dos fatores peso associados a cada volume de controle P_k .

A ideia do método de Lagrange é gerar uma nova função a ser minimizada incluindo as restrições impostas. Esta nova função é abaixo apresentada

$$\begin{aligned} F(\Delta w_k, \lambda_x, \lambda_y) = & \sum_{k=1}^{N_v} \Delta w_k^2 - \lambda_x \sum_{k=1}^{N_v} (1 + \Delta w_k)(x_{p_k} - x_v) \\ & - \lambda_y \sum_{k=1}^{N_v} (1 + \Delta w_k)(y_{p_k} - y_v) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

onde λ_x e λ_y são os multiplicadores de Lagrange. Eles multiplicam as restrições escritas na forma escalar, estabelecidas nas equações (2.23) e (2.24).

Considerando as condições de extremo da função definida na equação (A.9), surge o seguinte sistema de equações

$$\frac{\partial F}{\partial \Delta w_k} = 2\Delta w_k - \lambda_x(x_{p_k} - x_v) - \lambda_y(y_{p_k} - y_v) = 0 \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_x} = - \sum_{k=1}^{N_v} (1 + \Delta w_k)(x_{p_k} - x_v) = 0 \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_y} = - \sum_{k=1}^{N_v} (1 + \Delta w_k)(y_{p_k} - y_v) = 0 \quad (\text{A.12})$$

O referido sistema é formado por N_v equações, correspondentes às N_v incógnitas Δw_k , mais duas relacionadas aos multiplicadores de Lagrange, conseguindo-se agora obter o mesmo número de incógnitas e de equações. Vale lembrar que N_v representa o número de volumes de controle que cercam um dado vértice e seu valor é normalmente três para as malhas analisadas.

Isolando-se Δw_k na equação (A.10) tem-se

$$\Delta w_k = \frac{\lambda_x \Delta x_{p_k} + \lambda_y \Delta y_{p_k}}{2} \quad (\text{A.13})$$

sendo

$$\Delta x_{p_k} = x_{p_k} - x_v \quad (\text{A.14})$$

$$\Delta y_{p_k} = y_{p_k} - y_v$$

O próximo passo é dado ao substituir a equação (A.13) nas equações (A.11) e (A.12). São encontrados assim os valores dos multiplicadores de Lagrange

$$\lambda_x = \frac{2(I_{xy}R_y - I_{yy}R_x)}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2} \quad (\text{A.15})$$

$$\lambda_y = \frac{2(I_{xy}R_x - I_{xx}R_y)}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2} \quad (\text{A.16})$$

onde

$$\begin{aligned}
 I_{xx} &= \sum_{k=1}^{N_v} \Delta x_{p_k}^2 \\
 I_{yy} &= \sum_{k=1}^{N_v} \Delta y_{p_k}^2 \\
 I_{xy} &= \sum_{k=1}^{N_v} \Delta x_{p_k} \Delta y_{p_k} \\
 R_x &= \sum_{k=1}^{N_v} \Delta x_{p_k} \\
 R_y &= \sum_{k=1}^{N_v} \Delta y_{p_k}
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

Obtidos os referidos valores, retorna-se para a equação (A.13), obtendo-se então o valor de cada Δw_k

$$\Delta w_k = \frac{I_{xy}R_y - I_{yy}R_x}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}(\Delta x_{p_k}) + \frac{I_{xy}R_x - I_{xx}R_y}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}(\Delta y_{p_k}) \tag{A.18}$$

Assim, o valor do fator peso associado a um volume de controle cercando o dado vértice é finalmente dado por

$$w_k = 1 + \frac{I_{xy}R_y - I_{yy}R_x}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}(\Delta x_{p_k}) + \frac{I_{xy}R_x - I_{xx}R_y}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}(\Delta y_{p_k}) \tag{A.19}$$

B

CASO ESPECIAL DA REGRA DO PONTO MÉDIO

O objetivo aqui é demonstrar que para uma função linear a seguinte igualdade é satisfeita identicamente

$$\int_{\Delta S_f} \varphi \, d\mathbf{S} = \varphi_f \Delta \mathbf{S}_f \quad (\text{B.1})$$

De uma maneira mais específica, o que se pretende provar é que não há aproximação ao se empregar a regra o ponto médio na integral de superfície acima, na situação em que φ é uma função linear.

Considerando uma face do volume de controle como sendo uma superfície plana, o vetor área desta pode ser escrito de acordo com o vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$ normal à sua superfície. Sendo assim, a integral acima pode ser escrita por

$$\int_{\Delta S_f} \varphi \, d\mathbf{S} = \int_{\Delta S_f} \varphi \, \hat{\mathbf{n}} \, dS = \hat{\mathbf{n}} \int_{\Delta S_f} \varphi \, dS \quad (\text{B.2})$$

já que $\hat{\mathbf{n}}$ é constante na superfície em questão.

Escrevendo φ como uma função linear da seguinte forma

$$\varphi = ax + by + c \quad (\text{B.3})$$

com a, b, c constantes, a última integral da equação (B.2) pode ser assim apresentada

$$\int_{\Delta S_f} \varphi \, dS = a \int_{\Delta S_f} x \, dS + b \int_{\Delta S_f} y \, dS + c \, \Delta S_f \quad (\text{B.4})$$

De acordo com a definição de centroide de superfícies planas tem-se que

$$\int_{\Delta S_f} x \, dS = x_f \, \Delta S_f \quad (\text{B.5})$$

$$\int_{\Delta S_f} y \, dS = y_f \, \Delta S_f \quad (\text{B.6})$$

sendo x_f e y_f as coordenadas do centroide f da superfície conforme figura abaixo.

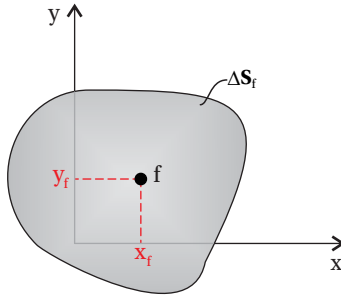


Figura B.1 – Superfície plana com representação das coordenadas de seu centroide.

Aplicando as equações (B.5) e (B.6) na equação (B.4) tem-se

$$\int_{\Delta S_f} \varphi \, dS = (a \, x_f + b \, y_f + c) \, \Delta S_f = \varphi_f \, \Delta S_f \quad (\text{B.7})$$

Substituindo a equação anterior na equação (B.2), obtém-se

$$\int_{\Delta S_f} \varphi \, \mathbf{dS} = \mathbf{\hat{n}} \, \varphi_f \, \Delta S_f = \varphi_f \, \mathbf{\hat{n}} \, \Delta S_f \quad (\text{B.8})$$

e como $\Delta \mathbf{S}_f = \mathbf{\hat{n}} \, \Delta S_f$, o apresentado na equação (B.1) é finalmente provado.